



Modélisation des transferts thermiques convectifs en régime turbulent à l'interface milieu poreux / paroi dans les lits catalytiques

Ilango Thiagalingam

► To cite this version:

Ilango Thiagalingam. Modélisation des transferts thermiques convectifs en régime turbulent à l'interface milieu poreux / paroi dans les lits catalytiques. Mécanique [physics]. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 2015. Français. NNT : 2015PA066126 . tel-01189270

HAL Id: tel-01189270

<https://theses.hal.science/tel-01189270>

Submitted on 1 Sep 2015

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Pierre et Marie Curie

ED 391 : Sciences mécaniques, acoustique, électronique & robotique de Paris

Institut Jean le Rond d'Alembert / Fluides Réactifs et Turbulence

Modélisation des transferts thermiques convectifs en régime turbulent à l'interface milieu poreux/paroi dans les lits catalytiques

Convective heat transfer modelling at the interface porous medium/wall in packed beds

Par Ilango THIAGALINGAM

Thèse de doctorat de Mécanique

Dirigée par Pierre SAGAUT

Présentée et soutenue publiquement le 1er Juin 2015

Devant un jury composé de :

CADALEN Sébastien, Ingénieur de Recherche

SAGAUT Pierre, Professeur AMU, M2P2

GOYEAU Benoît, Professeur Centrale Paris, EM2C

PANFILOV Michel, Professeur Université de Lorraine, LEMTA

ZALESKI Stéphane, Professeur UPMC, IJLRDA

TADRIST Lounès, Professeur AMU, IUSTI

Encadrant Air Liquide

Directeur de thèse

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

Modélisation des transferts thermiques
convectifs en régime turbulent à l'interface
milieu poreux/paroi dans les lits catalytiques

I. THIAGALINGAM

28 juin 2015

to my dad,

to my mum,

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à remercier les membres de mon jury pour avoir accepté de participer à la soutenance de ma thèse, particulièrement les rapporteurs (mais aussi les examinateurs) qui ont eu le courage de lire mon manuscrit volumineux.

Ce furent trois années fantastiques !

Le monde n'est-il pas construit autour d'un concept qu'est la confiance ? Les diverses relations qui lient les hommes ne sont-elles pas fondées sur cette belle notion ? Je ne saurai vous convaincre mais en tout cas moi j'y crois fermement. Partant de là, je tiens premièrement à remercier trois personnes qui m'ont fait confiance jusqu'au bout et j'espère vraiment leur avoir rendu raison. Je suis quelqu'un qui pense que la confiance, et bien cela se mérite mais sur ce projet les choses se sont un peu passé dans le sens inverse. Jusqu'à la dernière goutte d'encre, j'ai voulu mériter et honorer cette confiance si gracieusement reçue. Et, durant ces trois longues (t = début de la thèse) ou courtes (t = fin de la thèse) années, je dois avouer que cette volonté était une de mes plus grandes forces et une source de motivation sans précédent, ce qui m'a permis de surmonter les difficultés que j'ai pu rencontrer dans cette belle aventure.

La première personne à qui je pense est évidemment Pierre Sagaut, mon directeur de thèse. C'est un être illustre et du coup vous vous imposez à vous-même une certaine retenue et une certaine distance pour ne pas lui manquer de respect par mégarde. Cela crée une certaine barrière relationnelle au début, mais une fois que vous avez réussi à franchir cette première étape vous découvrez là une personne très adorable et un bon vivant plein d'humour. A travers le monde, on dit que c'est un soldat légendaire et qu'avec son épée, il met à genou tout problème de la mécanique des fluides. Mais, vous le verrez discuter avec ses écuyers (moi) d'égal à égal. Bref, un être surprenant ! Merci d'avoir cru en moi et surtout de m'avoir permis de suivre mes idées, de les avoir soutenues et de les avoir fait vivre.

Vient ensuite Fabrice Mathey, mon premier tuteur industriel et notre ex-expert "Fluent" au CRPS (Centre de Recherche Paris Saclay – Air Liquide) qui maintenant est descendu à Grenoble. Je pense que toutes les personnes qui ont travaillé avec lui souligneront toujours trois de ses atouts : compétence, modestie et sourire. C'était vraiment agréable de savoir qu'il y avait quelqu'un qui s'intéressait de près à ce que je faisais et merci encore pour les "Tips & Tricks" concernant le solveur Fluent.

Enfin, Sébastien Cadalen, mon tuteur industriel actuel. Très sympathique, proche (de par son jeune âge) et très réactif. Il a montré beaucoup d'intérêt pour mon sujet dès le départ, ce qui m'a permis de débloquent des situations très épineuses (maillage des points de contact). Je lui en suis très reconnaissant car si ce manuscrit existe en tant que tel aujourd'hui c'est aussi en partie grâce à lui. Les échanges qu'on a pu avoir concernant les aspects physiques et numériques à propos des échanges de chaleur turbulents en milieu poreux ont été passionnants. Merci d'avoir éclairé mon chemin sans quoi il m'aurait été difficile de voir le bout du tunnel.

Je n'oublie pas les d'Alembertiens et les d'Alembertiennes (Walid, Léo, David, Manish, Lucas, Audrey, Vincent, Cécile, Omar, Cheng, Bharat, Virgile, Adrian, Boris, Hervé, Olena, Charles, Raphaël et ... il y en a tant d'autres). La devise était "Bière, frites (commandé en kg chez "le roi de la frite") et Chinois-Japonais à volonté". Merci de m'avoir montré comment boire comme un trou, manger comme un chancre pour finalement tomber malade.

Je n'oublie pas non plus toutes les personnes formidables que j'ai rencontré au CRPS (les Alexandres, les Guillaumes, Thierry, Christine, Yves, Antonin, Mario, Romain, Hugues, Diana, Frédéric, Amélie, Caroline, Thomas, Elena, Baptiste, Cyprien, Katarina, Jeanne, Benjamin, Pierre-Marie, Fouad, Céline, Pierrick, JB, David, Angelo, ...). Je vous avoue que je suis devenu fan du magret de canard du café des Loges. Je dois aussi avouer que je commençais à en avoir assez d'être toujours premier au Laser Game (je vous laisse choisir le bon repère).

Un petit clin d'oeil à Marie, Amine, Iannis et Mathieu (ils se reconnaîtront).

Merci enfin à mes parents et à mes frères de m'avoir soutenu en créant autour de moi un écosystème de stabilité psychologique, ce qui m'a permis de rester sur le ring trois longues années.

Résumé

Le travail réalisé porte sur la modélisation à l'échelle macroscopique des transferts thermiques dans les lits catalytiques et au voisinage de la paroi. L'objectif principal de ce travail est de comprendre et de modéliser les mécanismes physiques responsables des transferts thermiques dans cette région. La physique proche paroi est capturée à l'échelle macroscopique de façon univoque à l'aide du concept de changement d'échelle et la notion de prise de moyenne volumique est étendue aux types de systèmes que nous considérons. Le coefficient de transfert à la paroi du modèle à deux coefficients $\lambda_r - h_w$ est premièrement décortiqué afin de mettre en lumière les mécanismes physiques contenus dans cette notion ainsi que le poids de leur contribution respective. Un modèle, basé sur la dynamique de l'écoulement et décrivant le transport de la chaleur dans la direction radiale, est ensuite dérivé à l'échelle macroscopique. Il met notamment en évidence une zone proche paroi particulière, dominée par l'effet de canalisation, qui amortit les transferts diffusifs dans la direction normale à la paroi. On montre ainsi que les transferts thermiques pilotés essentiellement par des mécanismes de dispersion mécanique sont limités dans cette région par des effets de résistance thermique de type convective. Finalement, une loi de paroi décrivant une couche limite perturbée par la matrice solide est utilisée pour faire le raccord à la paroi, ce qui a permis de prédire avec satisfaction la température à la paroi.

Abstract

This work deals with the modeling of near wall heat transfers in catalytic packed beds at the macroscopic scale. The main aims of the present work are the understanding and the modeling of physical mechanisms responsible for the heat transfers in the vicinity of the wall at the observation scale. Volume averaging concept is first extended to systems we consider. Thus, relevant physical mechanisms occurring in the near wall zone are unequivocally up-scaled from pore to bed scale. Then, the detailed analysis of the wall heat transfer coefficient, used in the popular two coefficient model $\lambda_r - h_w$, brings to light each physical mechanism and its respective weighted contribution lumped in it. A model, based on the flow dynamic and describing the radial heat transfer, is finally derived at the reactor scale. It highlights that a chan-

nel effect occurs in the near wall zone, damping transfers by diffusion in the wall normal direction. It is hence showed that heat transfers mainly driven by mechanical dispersion are facing a convective thermal resistance near the wall. A wall law is also derived to model boundary layer/porous medium interactions, which ultimately connect the porous media model to the wall. Wall temperature is thus recovered with satisfaction.

Table des matières

Remerciements	3
Resume	4
Abstract	5
Introduction	9
1 La chaîne numérique	19
1.1 Introduction	19
1.2 Etape 1 : l'empilement	20
1.3 Etape 2 : le maillage	28
1.3.1 Généralités	28
1.3.2 Maillage des lits catalytiques	31
1.4 Etape 3 : le calcul	40
1.4.1 Équations de conservation	40
1.4.2 Modèle de Turbulence [39, 40]	41
1.4.3 Loi de paroi[39, 41, 42, 43]	44
1.4.4 Résolution discrète des équations de conservation	51
1.4.5 Convergence en maillage	56
1.5 Conclusion	57
2 Concept de moyenne volumique	59
2.1 Introduction	60
2.2 Moyenne volumique	60
2.3 Équations de conservation de la masse, de la quantité de mou- vement et de l'énergie à l'échelle macroscopique	63
2.3.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles à l' échelle macroscopique	63
2.3.2 Équation de conservation de l'énergie	64
2.3.3 Convergence en maillage des quantités doublement moyennées	65

2.4	Volume Élémentaire Représentatif (VER)	67
2.4.1	Concept de Volume Élémentaire Représentatif	67
2.4.2	Volume Élémentaire Représentatif (VER) dans un milieu périodique [49, 50]	67
2.4.3	Volume élémentaire représentatif dans un milieu isotrope infini [49, 50]	68
2.5	Volume élémentaire représentatif adapté aux lits catalytiques .	69
2.5.1	VER tubulaire	69
2.5.2	Validation numérique	70
2.6	Conclusion	80
3	Transfert thermique à la Paroi : le nombre de Nusselt	81
3.1	Introduction	81
3.2	Étude bibliographique	82
3.2.1	Modèles 1D et 2D	82
3.2.2	Corrélations	84
3.3	Étude physique du nombre de Nusselt	87
3.3.1	Objectif	87
3.3.2	Nombre de Nusselt non local	87
3.4	Conclusion	123
4	Modélisation macroscopique de la turbulence et de la dispersion mécanique dans des lits catalytiques confinés	124
4.1	Introduction	125
4.2	Étude bibliographique	125
4.2.1	Modèle de Nakayama and al.[77]	126
4.2.2	Modèle de Teruel et al.[82, 83, 84, 85]	128
4.3	Modèle $\langle K \rangle - \langle \epsilon_T \rangle$	130
4.3.1	Énergie cinétique turbulente macroscopique	131
4.3.2	Energie cinétique dispersive	132
4.3.3	Energie cinétique totale	137
4.3.4	Le taux de dissipation turbulente macroscopique	138
4.3.5	Le taux de dissipation dispersive	140
4.3.6	Relations de fermeture	140
4.4	Validation du modèle macroscopique	149
4.4.1	Modèle macroscopique	149
4.4.2	Validation	153
4.5	Conclusion	160

5	Modèle macroscopique du transport de chaleur dans les lits catalytiques	162
5.1	Introduction	162
5.2	Étude bibliographique	164
5.2.1	Modèles à deux zones	164
5.2.2	Modèles basés sur la dynamique de l'écoulement	165
5.3	Modèle macroscopique de la diffusion thermique	167
5.3.1	État de l'art	167
5.3.2	Région intérieure : $r < R - d_p/2$	171
5.3.3	Région proche paroi : $R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10$	172
5.3.4	Raccord à la paroi : $R - d_p/10 \leq r < R$	173
5.4	Validation du modèle macroscopique	178
5.4.1	Le modèle macroscopique	178
5.4.2	Validation du modèle macroscopique	178
5.5	Conclusion	185
	Conclusion	186
A	Erreurs de discrétisation : une affaire de qualité de maillage [114, 36, 115, 116]	190
B	Calcul LES de référence	197
B.1	Introduction	197
B.2	Filtres et modèles de sous-maille[117, 41, 118]	199
B.3	LES vs. RANS : impact des modèles sur l'estimation de la turbulence	201
B.3.1	Calcul LES dans un tronçon d'empilement de sphères	201
B.3.2	LES vs. RANS	204
B.4	Conclusion	212
C	Modèle radial 1D	213
	Bibliographie	265

Introduction

Un des défis majeurs que les hommes auront à relever durant ce siècle est sans aucun doute celui de l'énergie. Une énergie à la fois bon marché (accessible à tous) et qui en même temps est respectueuse de la planète depuis sa production jusqu'à la consommation, voilà un objectif ambitieux pour des hommes courageux. Selon les statistiques de l'IEA (International Energy Agency), la production mondiale de l'énergie primaire en 2010 exprimée en tonnes d'équivalent pétrole (tep) était de 12,717 milliards de tep et les experts prévoient une croissance moyenne de 1.7% par an de la demande mondiale [1]. Ceci est en très grande partie lié à la demande de plus en plus élevée des pays en voie de développement et à l'accroissement de la population mondiale (environ 10 milliards à l'horizon 2050). En 2010, les sources de production d'énergie étaient très largement fossiles, comme le montre la figure 1. Mais cette répartition est vouée à changer très significativement dans les décennies à venir, notamment pour des raisons d'épuisement des réserves de combustibles fossiles mais aussi afin de contenir et réduire les émissions de gaz à effet de serre responsables du changement climatique. Il est très clair que pour atteindre un tel objectif il faut compter sur une gamme de solutions diverses qui devront survivre d'une part à une compétition sévère venant de ténors tels que le gaz, le pétrole ou le charbon qui détiennent aujourd'hui le marché (figure 2) et d'autre part mener une lutte fratricide entre elles, ce qui leur permettra de s'innover, de se dépasser et de s'installer sur le marché durablement pour ensuite arracher et absorber des parts de marché à ses pairs.

Dans ce contexte, la molécule de dihydrogène (appelée aussi hydrogène tout court dans le langage courant) composée de deux atomes d'hydrogène, se présente de plus en plus en tant que vecteur d'énergie d'avenir. En effet, on estime que le développement des piles à combustible à hydrogène donnera lieu à une production commerciale de véhicules particuliers électriques à l'ho-

Source primaire	Mtep	%
Pétrole	4 120	32,4
Charbon	3 470	27,3
Gaz naturel	2 720	21,4
Nucléaire	725	5,7
Hydraulique	292	2,3
Renouvelables + déchets	1 386	10,9
TOTAL	12 717	100

FIGURE 1 – Production mondiale de l'énergie primaire en 2010 en millions de tep.[1]

rizon 2030. Or, compte tenu de la production actuelle de l'hydrogène (autour de 630 milliards de Nm^3 en 2008) [4], si celle-ci devait répondre à des besoins énergétiques, elle ne représenterait qu'environ 1.7% de la consommation mondiale. Il faut donc accroître très significativement les capacités de production de l'hydrogène (en changeant par exemple l'ordre de grandeur de sa production) pour lui permettre de peser en tant que vecteur d'énergie. Mais à l'heure actuelle, il faut reconnaître que la valeur énergétique de l'hydrogène n'est pas réellement exploitée. En effet, l'hydrogène est plutôt valorisée et consommée en tant que matière première (figure 3) à travers le monde notamment par les industries de la chimie (production d'ammoniac) et de la pétrochimie (raffinage).

Bien qu'il existe diverses technologies de production d'hydrogène utilisant les énergies renouvelables telles que l'électrolyse de l'eau, la gazéification de la biomasse ou encore des procédés photoélectriques, plus de 90% de la production d'hydrogène est issue du reformage de combustibles fossiles. La technique consiste à casser les molécules d'hydrocarbure sous l'action de la chaleur pour libérer le dihydrogène. Le vaporeformage du méthane est le procédé le plus

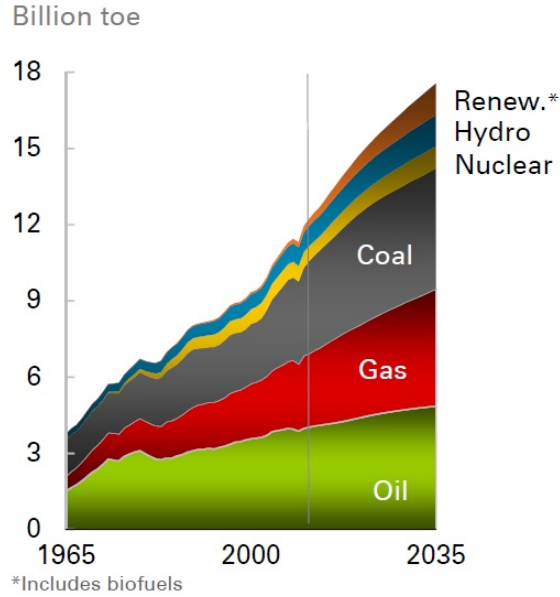


FIGURE 2 – Évolution prévisible de la consommation d’énergie dans le monde[2].(Attention : Hydro = Energie hydraulique)

couramment utilisé dans la pratique en raison de son coût peu élevé et de son rendement énergétique global satisfaisant pour une production à très grande échelle. Cette première étape de production a pour premier but de répondre à une demande de plus en plus importante. Elle peut être progressivement pilotée vers une nouvelle étape où le procédé de fabrication est amélioré en équipant les sources de production, de technologies permettant la séquestration du CO_2 émis lors de la production de l’hydrogène. L’étape ultime est en effet l’utilisation de sources d’énergie autre que fossiles.

Regardons de plus près la technologie du vaporeformage [5]. La technique consiste à provoquer la transformation du méthane à l’aide de vapeur d’eau et à travers différentes réactions chimiques. La première réaction endothermique a lieu lorsqu’une molécule de méthane rencontre une molécule d’eau :



Cette réaction est optimisée par les conditions de température (entre 840 et 920° C) et de pression (20 à 30 bars) adéquates et l’introduction de catalyseurs (recouverts de nickel) accélérant la réaction. Il s’ensuit une seconde

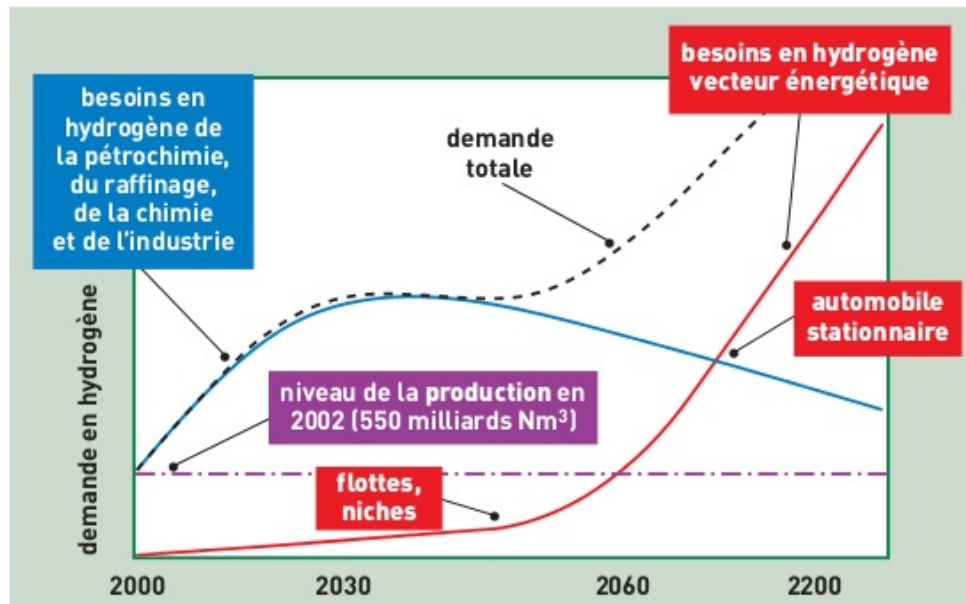
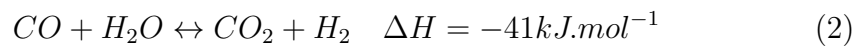


FIGURE 3 – Évolution prévisible de la demande en hydrogène.[3]

réaction de conversion du monoxyde de carbone (CO) légèrement exothermique appelée aussi *Water Gas Shift* :



Le bilan de la réaction est endothermique et contient entre 16 et 25% de CO_2 en volume nécessitant une étape supplémentaire de séparation et de purification de l'hydrogène produit.



La technologie PSA (*Pressure Swing Adsorption*) est la plus couramment utilisée lors de cette étape de purification. Elle est basée sur l'adsorption sélective des impuretés sur un lit de tamis moléculaire. On obtient ainsi un hydrogène très pur (jusqu'à 99.9% voire plus). Sur la figure 4 qui représente une usine de reformage du méthane, on peut localiser les différentes unités de production intervenant à chaque étape intermédiaire du vaporeformage.

Nous nous intéressons particulièrement à la première étape de la transformation du méthane qui a lieu dans les fourneaux. Il s'agit d'une chambre



FIGURE 4 – Usine de production d’hydrogène par vaporeformage du gaz naturel

de combustion dans laquelle sont disposées des rangées de tubes verticaux de diamètre avoisinant le décimètre et de hauteur de l’ordre de quelques mètres et contenant des catalyseurs (figure 5). Ces tubes sont chauffés à l’aide de brûleurs afin d’apporter la chaleur nécessaire pour le bon déroulement des réactions catalytiques à l’intérieur des tubes. Sur le plan industriel, il est intéressant de pouvoir simuler sur ordinateur la chambre de combustion (figure 6) en son intégralité (depuis l’échelle moléculaire caractérisant les différentes réactions à l’intérieur des tubes jusqu’à l’échelle du four caractérisant l’approvisionnement, la production, les rejets et les pertes) et cela en temps réel. Ceci permettrait de mener des études de performance globale, d’optimisation de procédés et rendrait possible la détection d’éventuelles anomalies de fonctionnement afin d’être par exemple en mesure de répondre à des questions de sécurité de l’usine. Mais à l’heure actuelle, une telle simulation n’est pas envisageable pour des raisons liées aux ressources informatiques insuffisantes et au temps de calcul astronomique que cela nécessiterait. Il faut donc recourir à des modèles simplifiés décrivant les performances moyennes à chaque échelle d’intérêt. Sur cet état d’esprit, la modélisation de l’intérieur

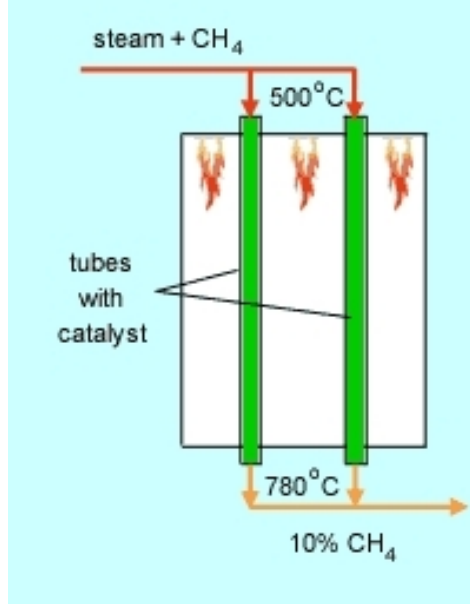


FIGURE 5 – Schéma simplifié de l'intérieur d'un four SMR (Steam Methane Reformer)

des tubes est généralement très simplifiée. On admet que l'intérieur des tubes est homogène, l'écoulement est unidirectionnel et que l'activité catalytique se fait le long de l'axe du tube (variation de la température, du taux de conversion et donc de la quantité des différents produits formés et celle de la consommation des réactifs). Ces hypothèses permettent d'avoir un modèle homogène 1D qui est une description au premier ordre d'un système bien plus complexe [5]. Ce premier modèle est cependant suffisant pour estimer la perte de charge moyenne à l'intérieur des tubes en utilisant par exemple la corrélation d'Ergun [6] :

$$-\frac{dP}{dz} = \frac{f\rho U_s^2}{Sd_p} \quad (4)$$

avec P la pression, ρ la densité du fluide, U_s la vitesse superficielle ou vitesse de Darcy, d_p le diamètre équivalent du catalyseur ($d_p = [6V/\pi]^{1/3}$ avec V le volume du catalyseur) et S la sphéricité du catalyseur. Le facteur f représente la résistance à l'écoulement. Il contient deux coefficients empiriques A et B permettant de prendre en compte l'influence de la taille et de la forme des

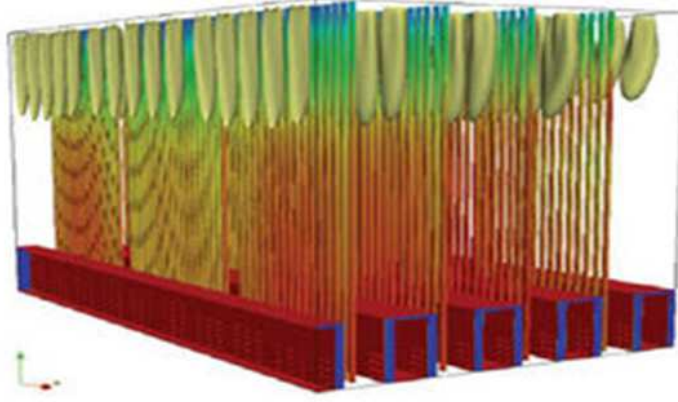


FIGURE 6 – L'intérieur d'une chambre de combustion

catalyseurs.

$$f = \frac{1 - \phi_0}{\phi_0^3} \left(A + B \frac{1 - \phi_0}{Re_p} \right) \quad (5)$$

avec ϕ_0 la porosité moyenne, Re_p le nombre de Reynolds basé sur la vitesse superficielle et le diamètre équivalent. Pour des catalyseurs sphériques, $A = 1.75$ et $B = 150$ [6]. Cette première approche met par exemple en évidence qu'il est possible de réduire la perte de charge en augmentant la taille des catalyseurs. Sur le même principe, le transfert de chaleur dans le système en absence de réactions peut être réduit à un modèle de transport 1D :

$$-U_s \rho C_p \frac{dT}{dz} + \frac{4U}{d_t} (T_w - T) = 0 \quad (6)$$

avec C_p la capacité calorifique massique du fluide, T la température moyenne du milieu homogène, T_w la température sur la paroi du tube et d_t le diamètre du tube. L'inverse de la conductivité thermique totale $1/U$ peut être exprimé comme la somme de différentes résistances thermiques en série :

$$\frac{1}{U} = R_t + R_i + R_w \quad (7)$$

R_t est la résistance du tube (résistance au transfert par conduction) qui est négligeable et on ne s'en souciera plus dans la suite car on considérera que le tube est d'épaisseur nulle. R_i est la résistance thermique moyenne à l'intérieur du domaine considéré homogène. Cette contribution peut encore être décomposée en une composante statique et une composante dynamique. La résistance statique est celle mesurée lorsque le fluide est au repos. Elle regroupe la conduction dans le fluide et dans le solide ainsi que les transferts radiatifs. la composante dynamique est celle qui domine à l'intérieur du lit catalytique dans les conditions opératoires et est exprimée comme étant proportionnelle au nombre de Prandtl et au nombre de Reynolds. Elle est essentiellement pilotée par le mélange turbulent et dispersif. Enfin, R_w est la résistance au transfert à l'interface tube/lit catalytique.

Ce type de modèle est largement utilisé, à quelques variations mineures près, par la majorité des industriels depuis plus de 50 ans pour la conception des réacteurs et les calculs de performance et d'optimisation. Ceci étant, les limites du modèle ainsi que ses défauts et ses insuffisances ont été aussi largement étudiés et signalés massivement dans la littérature. Une synthèse complète retraçant les différentes études mettant en évidence les insuffisances du modèle 1D et les avancées réalisées dans la compréhension des transferts de masse, de la quantité de mouvement et de la chaleur dans les réacteurs catalytiques ainsi que l'état de l'art de la modélisation à l'aube de l'introduction de la CFD dans ce domaine de recherche est présentée dans [7, 8]. Les modèles 1D sont en effet incapables de capturer les variations dans la direction radiale ou azimutale. De nombreux auteurs ont observé [9, 10] par exemple des différences notables entre les pertes de charge mesurées dans les tubes et les corrélations empiriques disponibles dans la littérature. Notons que les tubes utilisés dans la pratique sont caractérisés par un rapport entre le diamètre du tube et le diamètre des particules relativement petit ($d_t/d_p < 10$). Pour de tels rapports, la paroi du tube va fortement briser l'homogénéité de l'empilement dans la direction radiale rendant ainsi l'écoulement anisotrope et hétérogène[11, 12]. Les estimations de pertes de charge par les modèles 1D sont ainsi de moins en moins pertinentes avec la décroissance du rapport d_t/d_p . Des tentatives de correction des corrélations existantes en incluant explicitement le rapport d_t/d_p ont été proposées [13, 14, 15, 16, 17] pour sauver le modèle 1D, mais il est difficile de combler toutes les insuffisances par ce genre d'approche.

Des modèles 2D ont très rapidement vu le jour pour décrire les transferts thermiques dans la direction radiale à la suite de mesures mettant en évidence

l'existence de gradients de température sévères dans cette direction, notamment près des parois du tube [18, 19]. Ces modèles basés sur deux coefficients constants, λ_r la conductivité thermique effective du lit catalytique dans la direction radiale et h_w le coefficient de transfert à la paroi, pour décrire le transfert radial sont toujours loin de faire l'unanimité dans la littérature et chez les industriels. En effet, les corrélations présentées par les différents auteurs pour le coefficient de transfert effectif à l'intérieur du lit catalytique λ_r sont assez dispersées et cette dispersion des corrélations est encore plus marquée pour le coefficient de transfert à la paroi h_w [20]. L'incertitude notable dont souffrent les coefficients de transfert rend les modèles 2D peu fiables montrant par la même occasion que les mécanismes physiques réels restent encore peu compris. Certains auteurs disqualifient l'existence même du coefficient h_w qui à leurs yeux n'est adapté que si le saut de température (équation (3.5)) à la paroi est confiné dans une couche très mince et non pour des variations continues s'opérant sur une couche assez épaisse [21]. D'autres poursuivent en proposant, pour s'affranchir des insuffisances des modèles classiques de type $\lambda_r - h_w$, une conductivité thermique radiale variable dans l'espace $\lambda_r(r)$ et qui s'amortit en s'approchant de la paroi des tubes [22].

Dans ce contexte, l'introduction du calcul numérique tridimensionnel pour simuler les écoulements et les transferts thermiques dans les lits catalytiques marque un tournant majeur dans la compréhension et la modélisation des mécanismes physiques à l'intérieur des réacteurs tubulaires [23]. Bien que cette méthode présente ses propres incertitudes et ses propres limites tout en restant encore assez coûteuse pour une utilisation pratique au niveau industriel, elle est aujourd'hui un outil incontournable et complémentaire permettant de comprendre les mécanismes physiques complexes s'opérant dans ces types de milieu. En effet, la simulation numérique 3D permet d'avoir accès à des informations locales précises telles que la porosité locale, les lignes de champs de vitesse autour des particules solides, les zones de recirculation ou encore les champs de température [24, 25] ; des informations qui étaient difficiles à obtenir jusqu'à présent par des techniques expérimentales seules. Elle rend ainsi possible la constitution d'une base de donnée très détaillée pouvant par la suite être exploitée pour reconstruire des informations à l'échelle macroscopique et vérifier la pertinence des hypothèses sur lesquelles sont construits les modèles simplifiés mais aussi pour proposer des modèles plus généraux et définir les zones de validité des modèles existants. C'est dans ce contexte et cet état d'esprit que l'étude présentée ci-dessous a été réalisée.

Le Chapitre 1 est consacré à la mise en place des différentes étapes per-

mettant de générer une base de données à l'aide de simulations 3D réalisées à l'échelle du pore. Au chapitre 2, nous mettons en place une méthodologie visant à exploiter la base de données générée afin de reconstruire des quantités à l'échelle d'observation de façon univoque. Deux approches sont ensuite adoptées pour comprendre et modéliser les transferts thermiques dans les tubes SMR (Steam Methane Reformer). L'attention est particulièrement portée sur les mécanismes physiques pilotant les transferts thermiques dans la zone proche paroi où les gradients de température sont importants. Le chapitre 3 est consacré au modèle classique (modèle à deux coefficients $\lambda_r - h_w$). On se focalise notamment sur les mécanismes physiques gouvernant les transferts thermiques à la paroi. Les chapitres 4 et 5 traitent quant à eux de l'approche alternative et concurrente au modèle classique. Elle consiste à se dispenser du coefficient de transfert à la paroi au profit d'une conductivité effective dépendant de la position radiale $\lambda_{eff}(r)$. Le modèle dérivé dans ces chapitres est validé sur les données de référence générées au chapitre 1.

Chapitre 1

La chaîne numérique

Sommaire

1.1	Introduction	19
1.2	Etape 1 : l'empilement	20
1.3	Etape 2 : le maillage	28
1.3.1	Généralités	28
1.3.2	Maillage des lits catalytiques	31
1.4	Etape 3 : le calcul	40
1.4.1	Équations de conservation	40
1.4.2	Modèle de Turbulence [39, 40]	41
1.4.3	Loi de paroi[39, 41, 42, 43]	44
1.4.4	Résolution discrète des équations de conservation	51
1.4.5	Convergence en maillage	56
1.5	Conclusion	57

1.1 Introduction

L'objectif de ce chapitre est de décrire la chaîne numérique depuis la conception des systèmes de référence jusqu'à la réalisation d'expériences (simulations) numériques. Les données récoltées à la suite de cette chaîne seront considérées comme étant des données de référence. Elles seront exploitées par la suite pour comprendre les mécanismes physiques pilotant les écoulements turbulents et les transferts de chaleurs dans les lits catalytiques, pour construire un modèle à l'échelle de l'observation et pour valider le

modèle macroscopique. On comprend ainsi l'importance de ces systèmes qui doivent être représentatifs du système physique auquel nous nous intéressons. Nous allons dans ce chapitre détailler les différentes étapes de la chaîne numérique qui vont nous permettre de poser clairement dès maintenant les hypothèses de simplification qui ont été nécessaires d'un point de vue pratique mais aussi de quantifier les erreurs qui en découlent. Ceci nous permettra lors de l'analyse des résultats de relier directement les simplifications faites et les modèles utilisés lors de la conception du prototype aux informations macroscopiques reconstruites avec la base de données. La chaîne comporte en tout trois étapes à savoir la réalisation de l'empilement de particules solides dans le réacteur tubulaire, le maillage de la géométrie obtenue et la résolution 3D des équations de Navier-Stokes et de l'équation de l'énergie, simplifiées à l'aide d'hypothèses et de modèles appropriés.

1.2 Etape 1 : l'empilement

Dans la pratique, les catalyseurs sont tout simplement déversés dans les réacteurs tubulaires. Cela donne lieu à une disposition de particules complètement aléatoire. Pour reproduire de tels empilements, nous avons eu recours à un logiciel commercial *DigiPacTM* dont la capacité à reproduire des empilements réels a été validée dans différentes configurations [26, 27, 28, 29]. Nous allons décrire ici les grandes lignes sur lesquelles repose l'algorithme utilisé par le code commercial pour générer des empilements aléatoires. Il s'agit d'un algorithme qui est à mi-chemin entre une approche stochastique (marche aléatoire) et une approche déterministe DEM (*Discrete Element Method*). Il consiste à placer des particules de façon aléatoire dans un domaine défini et à les déplacer dans différentes directions. Ces directions sont soit aléatoirement choisies tout en écartant les configurations donnant lieu à des chevauchements entre particules ou entre particules et les bords du récipient, soit guidées par la force d'interaction mécanique. Le logiciel repose sur une technique originale qui consiste à digitaliser les objets et l'espace assurant ainsi la rapidité de l'algorithme et l'utilisation modérée de l'espace mémoire. En effet, les objets que l'on souhaite empiler dans un récipient donné sont découpés en voxels avec une résolution que l'utilisateur peut définir et l'espace est réduite à une grille cartésienne 3D de même résolution. Ainsi, tout objet aussi complexe soit-il, n'est plus qu'une collection cohérente de voxels facilement représentable à l'aide d'entiers non nuls, l'entier nul étant associé

à l'espace vide. Pour un empilement d'objets identiques par exemple, on aura une collection de 1 et de 0, ce qui est très pratique pour stocker les informations concernant l'emplacement des objets dans un empilement mais aussi pour détecter les chevauchements. Il faut cependant noter que le contour de

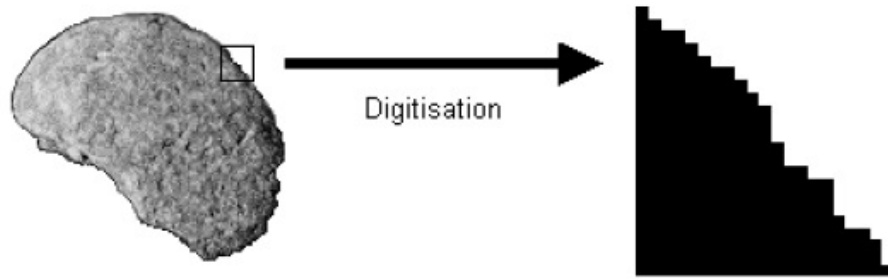


FIGURE 1.1 – Digitalisation d'objets.

l'objet, en forme d'escalier (figure 1.1), va inévitablement modifier la forme des objets et la porosité de l'empilement. Il faut donc choisir judicieusement la finesse du maillage en fonction de la précision que l'on souhaite avoir sur la forme des objets et des ressources que l'on dispose en terme de mémoire et de temps de calcul.

L'algorithme qui régit l'empilement est assez simple. A des intervalles de temps réguliers fixés par l'utilisateur, on tente d'ajouter (pas de chevauchement avec d'autres particules) un nombre défini de particules à partir d'une région (qui peut être un point, une ligne ou une surface) localisée sur un plan perpendiculaire à l'axe du cylindre. A chaque itération, une translation de pas fixé à un voxel est tentée et acceptée si aucun chevauchement avec une autre particule ou les frontières du récipient n'est détecté. On tente ensuite une rotation avec les mêmes critères d'acceptation lorsque la particule n'est pas sphérique. Le mouvement peut soit avoir lieu dans une direction aléatoire (26 possibilités pour une translation dans un espace 3D mais les directions ayant une composante dans la direction opposée au champs de pesanteur ont une probabilité nulle de se réaliser) si l'algorithme RWP (*Random Walk Packing*) est choisi ou peut être orienté par le bilan des forces (collisions) et des moments (modification de la probabilité affectée à chaque direction par le bilan des forces de contact) avec l'algorithme CGP (*Collision Guided Packing*). On peut considérer que l'état final est atteint (empilement convergé) dès lors qu'aucune particule ne peut être ajoutée à l'empilement, ce qui en

pratique revient à dire qu’aucune particule n’a été ajoutée sur un nombre d’itérations très grand.

Considérons pour notre étude un empilement de sphères de diamètre 20 voxels dans un tube de diamètre et de hauteur 200 voxels. Pour estimer l’erreur engendrée par le choix des dimensions, considérons un cube de côté D et une sphère de rayon $D/2$. Le rapport du volume de la sphère sur le volume du cube est égal à $\pi/6 \approx 0.523599$. La constante obtenue est la limite continue du rapport des volumes considérés lorsque la taille des voxels tend vers 0. Pour la résolution choisie dans le cas de notre empilement, le rapport des volumes est de 0.528. La porosité est sous évaluée d’environ 0.84% ce qui est acceptable comparé aux autres sources d’erreurs détaillées plus bas. Notons que si la résolution est quatre fois supérieure (sphères de diamètre 80 voxels dans un tube de diamètre et de hauteur 800 voxels), le rapport des volumes est bien plus proche de la valeur théorique (0.523625) et l’erreur se réduit à 0.005%. L’erreur faite sur le rayon des particules peut être évaluée par l’expression,

$$\Delta V_p = 4\pi r_p^2 \Delta r_p \quad (1.1)$$

Elle est d’environ 0.28%. Ainsi, lors de la reconstruction de la géométrie à partir des coordonnées du centre des sphères, on peut s’attendre à des chevauchements entre particules ou entre particules et paroi d’une distance de $0.0056r_p$ au plus.

Afin d’éviter les effets de bord lors de l’étape calcul, il est souhaitable de pouvoir imposer des conditions de périodicité à l’entrée et à la sortie du tube. Pour ce faire, la géométrie doit être rigoureusement identique sur la face d’entrée et celle de sortie. On impose donc des conditions aux limites périodiques sur ces faces à l’étape de l’empilement. Autrement dit, si une partie d’un objet ou l’objet tout entier franchit par exemple la face de sortie, les voxels sortant du domaine seront réintroduits dans le domaine par la face d’entrée conformément à la symétrie de translation (figure 1.6).

On commence l’empilement avec l’algorithme CGP. On admet qu’il a convergé lorsqu’aucune particule ne peut y être ajoutée, ce qui revient à dire dans la pratique qu’il n’y a pas eu d’ajout de particule durant un très grand nombre d’itérations. On obtient ainsi un empilement assez homogène et compact le long de l’axe Z mais présentant cependant un espace vide à l’entrée et à la sortie du tube. On active ensuite l’algorithme RPP (*Random Placement Packing*) qui va aléatoirement positionner les particules une par une dans le domaine en évitant tout chevauchement, ce qui permet de combler les es-

paces vides aux deux extrémités. On active alors durant quelques itérations le mode "lifting" qui consiste à tradater les particules dans la direction Z (l'axe du cylindre) d'une amplitude que l'on fixe (égale environ au rayon de la particule). Ainsi, on procède à une première étape d'homogénéisation de l'empilement le long de l'axe Z. On active de nouveau l'algorithme RPP puis le mode "lifting". La procédure est répétée jusqu'à obtenir un empilement homogène et périodique le long de l'axe Z (figure 1.7).

Une corrélation de la porosité moyenne d'un empilement moyennement dense de sphères tel que $d_p/d_t \leq 0.256$, avec d_p le diamètre de la particule et d_t le diamètre du tube s'écrit [30],

$$\phi_{ref} = 0.40 + 0.01(\exp^{10.686d_p/d_t} - 1) \quad (1.2)$$

L'erreur faite sur la porosité moyenne est répertoriée sur la Table 1.1. Elle est estimée par l'expression,

$$\Delta\phi = 100 \frac{|\phi_{moy} - \phi_{ref}|}{\phi_{ref}} \quad (1.3)$$

avec,

$$\phi_{moy} = \frac{1}{z_1 - z_0} \int_{z_0}^{z_1} \phi(z) dz \quad (1.4)$$

L'erreur constatée vient essentiellement de l'espace vide en entrée et en sortie mal comblée par l'algorithme RPP et qui a été propagée le long de l'axe Z par le mode "lifting" pour retrouver une porosité homogène le long de l'axe Z (figures 1.2 et 1.3). La déviation moyenne de la porosité axiale peut être évaluée par l'expression,

$$\delta\phi = 100 \frac{1}{z_1 - z_0} \int_{z_0}^{z_1} \frac{|\phi(z) - \phi_{moy}|}{\phi_{moy}} dz \quad (1.5)$$

Premièrement notons que plus le rapport entre le diamètre de la particule et le diamètre du tube est élevé, plus il est difficile d'obtenir un empilement homogène le long de l'axe Z. Malgré l'erreur élevée reportée sur la Table 1.1, on fera l'hypothèse que l'homogénéité est conservée le long de Z. Ensuite, on remarque que la porosité moyenne ϕ_{moy} est clairement surévaluée. C'est cependant le prix à payer pour récupérer un empilement périodique. En effet, comme nous nous intéressons aux transferts s'effectuant dans la direction radiale, il faut atténuer autant que possible les développements le long de l'axe

Z ($\nabla_z \psi = 0$) pour isoler ainsi les développements dans la direction radiale. De plus, la périodicité nous épargne des effets de bord et place d'ores et déjà l'écoulement en régime établi. Certes, la porosité moyenne est surévaluée, mais ce n'est pas une contrainte handicapante pour étudier et comprendre la physique gouvernant les transferts radiaux. C'est en effet, le profil radial de la porosité qui va être un facteur prépondérant pour capturer les mécanismes physiques pilotant les transferts radiaux (figures 1.4 et 1.5). On peut voir sur ces figures que la variation radiale de la porosité est reproduite avec satisfaction. En effet, la porosité est égale à 1 à la paroi et elle décroît jusqu'à une distance de $d_p/2$ avec une forte pente. Le profil oscillatoire de période avoisinant d_p est ensuite lentement amorti en s'éloignant de la paroi. Ce profil particulier de la porosité montre l'influence de la paroi sur l'empilement. En effet, en région proche paroi (sur une épaisseur de $5d_p$ typiquement), l'empilement est statistiquement très ordonné. La position moyenne des particules est identifiable en localisant les extrema locaux du profil radial. Par exemple, le minimum en $r = R - d_p/2$ localise la position moyenne du centre des sphères côtoyant la paroi. En s'éloignant de la paroi, le profil s'aplatit révélant le caractère désordonné de l'empilement loin des parois.

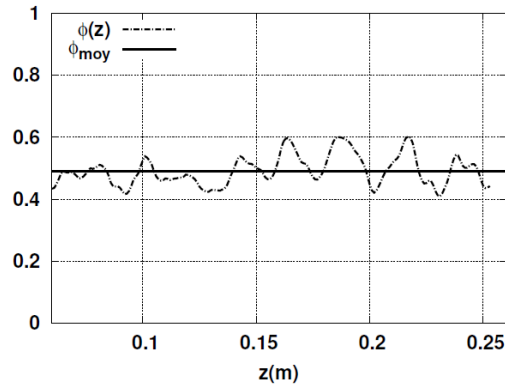


FIGURE 1.2 – Porosité le long de l'axe Z (Cas 1).

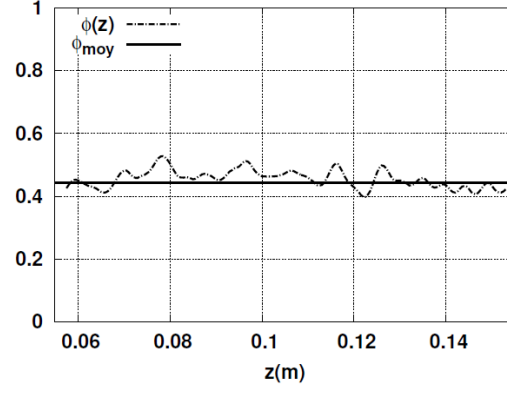


FIGURE 1.3 – Porosité le long de l'axe Z (Cas 2).

Cas	forme des particules	d_p/d_t	ϕ_{moy}	ϕ_{ref}	$\Delta\phi$	$\delta\phi$
1	sphérique	0.2	0.4907	0.4748	3.36%	8%
2	sphérique	0.1	0.443	0.4191	5.7%	5%

TABLE 1.1 – Évaluation de la porosité moyenne ϕ_{moy} dans deux empilements de sphères.

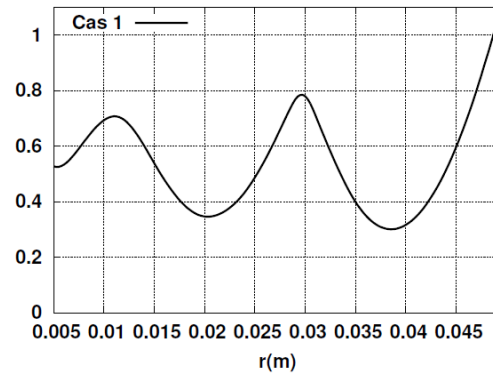


FIGURE 1.4 – Porosité radiale (Cas 1).

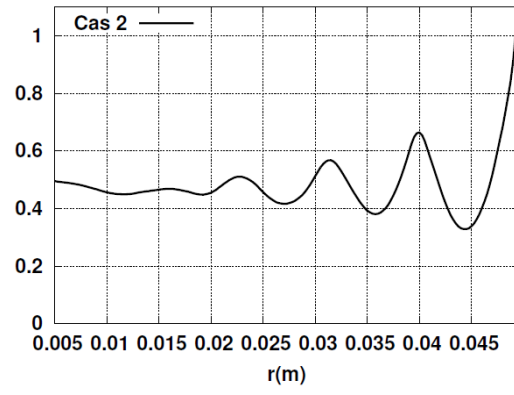


FIGURE 1.5 – Porosité radiale (Cas 2).

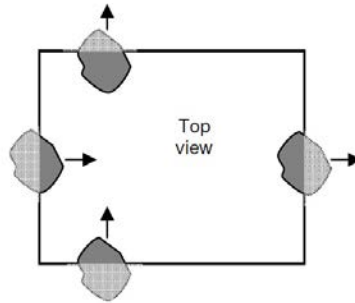


FIGURE 1.6 – Condition de périodicité.

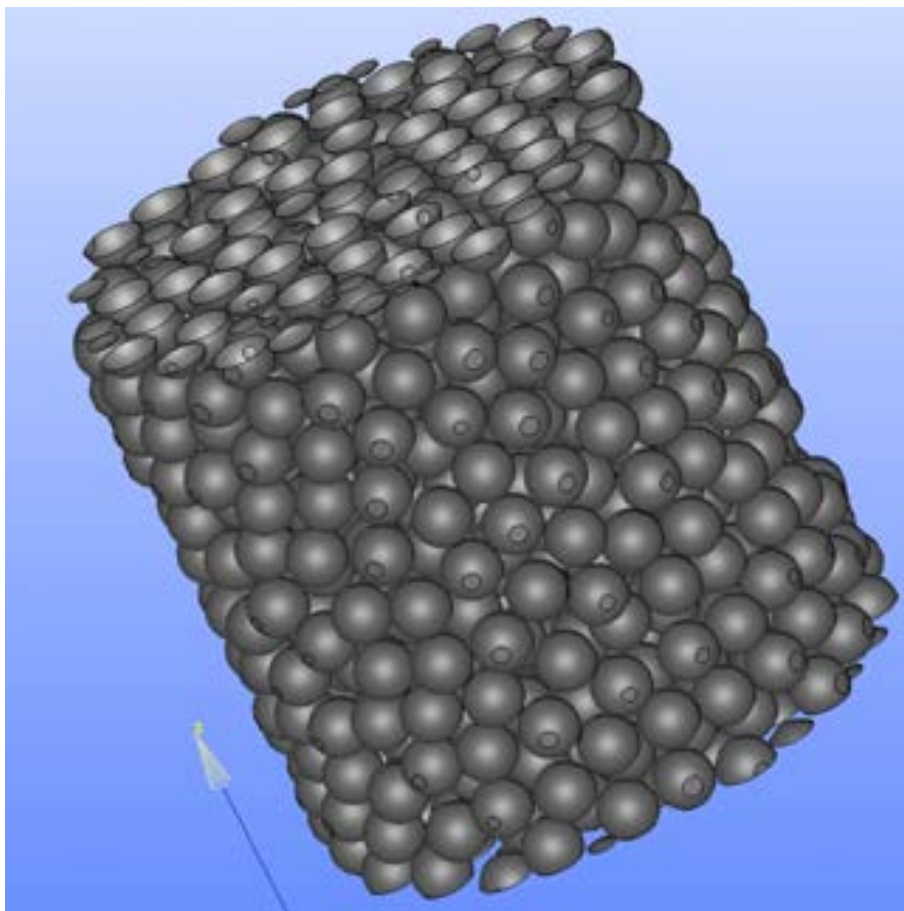


FIGURE 1.7 – Empilement de sphères dans un tube dont l'entrée et la sortie sont périodiquement liées (Cas 2).

1.3 Etape 2 : le maillage

1.3.1 Généralités

Le domaine fluide (milieu continu) est subdivisé (discrétisation spatiale) à l'aide d'éléments géométriques simples. Le pavage du domaine se fait en générale avec des hexaèdres, des tétraèdres ou des polyèdres (figure 1.8). Le choix de la forme géométrique des éléments dépend souvent de la complexité du domaine à mailler. Pour des géométries simples, un pavage avec des éléments hexaédriques est préféré alors que pour des géométries très complexes, le pavage n'est possible qu'avec des tétraèdres ou des polyèdres. Un maillage hybride (tétra-prisme-hexa ou poly-hexa) est souvent réalisable pour la plupart des géométries complexes rencontrées : les zones proche paroi où se développe la couche limite sont pavées avec des éléments hexaédriques afin d'aligner le maillage dans la direction de l'écoulement alors que les zones plus éloignées sont pavées avec des éléments polyédriques ou tétraédriques, la transition s'opérant à l'aide de prismes lorsqu'il s'agit de tétraèdres (figure 1.9). La forme géométrique optimale est en effet la forme hexaédrique car la possibilité d'aligner la normale des faces avec la direction de l'écoulement permet de réduire considérablement les erreurs de discrétisation (voir paragraphe 1.4.4). Les formes tétraédriques sont quant à elles celles qui génèrent le plus d'erreur.

Maillage structuré et non structuré

Un maillage est dit structuré si celui-ci est généré par simple reproduction d'une forme géométrique élémentaire selon une loi déterminée. Ce faisant, tout nœud d'une maille peut être localisé à l'aide d'un triplet (i,j,k) donné par une loi simple. A l'inverse, un maillage non structuré est généré avec une forme géométrique (tétraédrique par exemple) dont les dimensions, angles et orientations peuvent être à priori quelconques (topologie arbitraire). La distribution des nœuds n'est donc pas régie par une loi prédéfinie, autrement dit il n'est pas possible de prédire la position d'un nœud à l'avance, celle-ci n'étant déterminée que lors la réalisation du maillage (figure 1.10).

Maillage conforme et non-conforme

Un maillage est dit conforme si aucune discontinuité de pavage existe entre les différentes parties du domaine. Autrement dit, tous les nœuds (extrémités

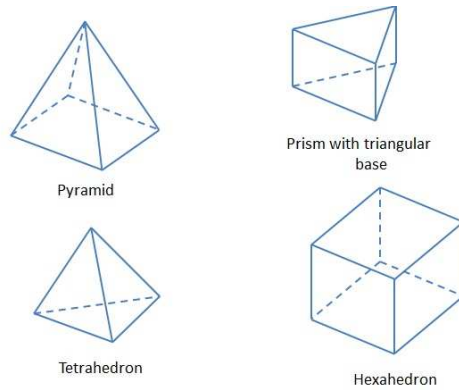


FIGURE 1.8 – Formes géométriques couramment utilisées pour discrétiser un domaine continu [31].

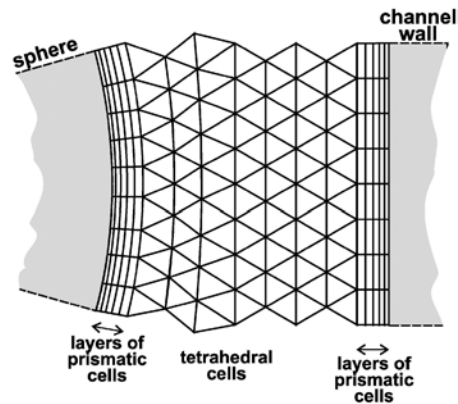


FIGURE 1.9 – Maillage hybride [32].

d'arête) sont partagés avec les cellules voisines immédiates et sont essentiels pour délimiter les contours de toutes ces cellules (l'absence d'un tel noeud va remettre en cause l'existence de toutes les cellules le partageant). On parle de non-conformité dès lors qu'à l'interface séparant deux parties du domaine certains noeuds peuvent ne pas être essentiels pour toutes les cellules les partageant. Une arête peut avoir une extrémité sur la face ou sur une arête

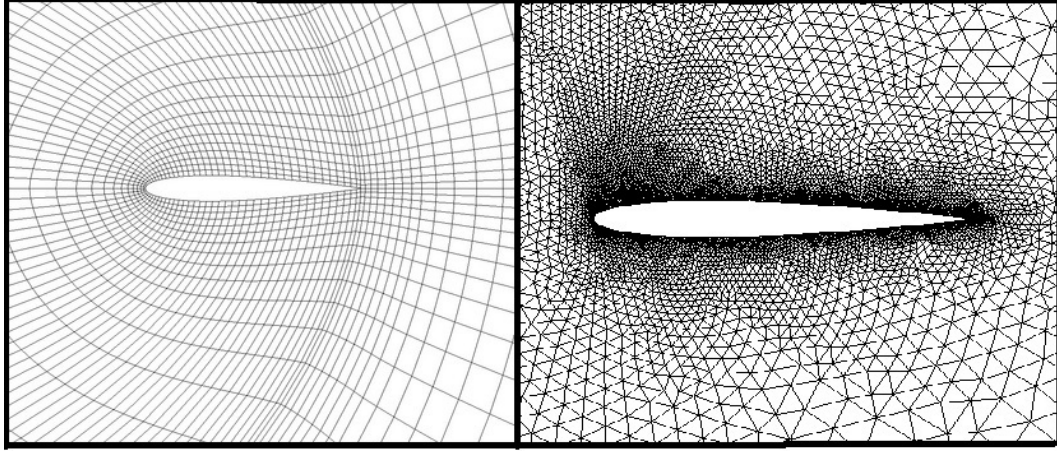


FIGURE 1.10 – Maillage structuré (gauche) [33] et maillage non structuré (droite) [34].

d'une autre cellule. La disparition de ce noeud ne met pas en cause l'existence de la cellule accueillant le noeud ailleurs que sur ses propres extrémités. De tels noeuds créent ainsi une discontinuité de pavage (figure 1.11).

Qualité du maillage

La qualité du maillage est mesurée par un certain nombre de critères non indépendants.

Uniformité : Soient deux cellules voisines de centre P et N. Si la face interne partagée par ces deux cellules se trouve au milieu du segment $[PN]$, alors on dit que ces cellules sont uniformes. Plus les différences de forme et de volume entre les cellules voisines sont importantes, plus on s'éloigne de l'uniformité.

$$f_x = \frac{|\mathbf{x}_{f_i} - \mathbf{x}_N|}{|\vec{PN}|} \quad (1.6)$$

avec $\mathbf{x}_{f_i}$, le vecteur localisant le point d'intersection du vecteur $\vec{PN}$ sur la face interne et $\mathbf{x}_N$, le vecteur localisant le centre N d'une des deux cellules.

L'orthogonalité : Elle est mesurée par l'angle formé par le vecteur $\vec{PN}$ reliant le centre de deux cellules adjacentes à une face et la normale à cette face $\mathbf{S}$. La qualité est d'autant meilleure que l'angle ainsi formé tend vers zéro (figure 1.12).

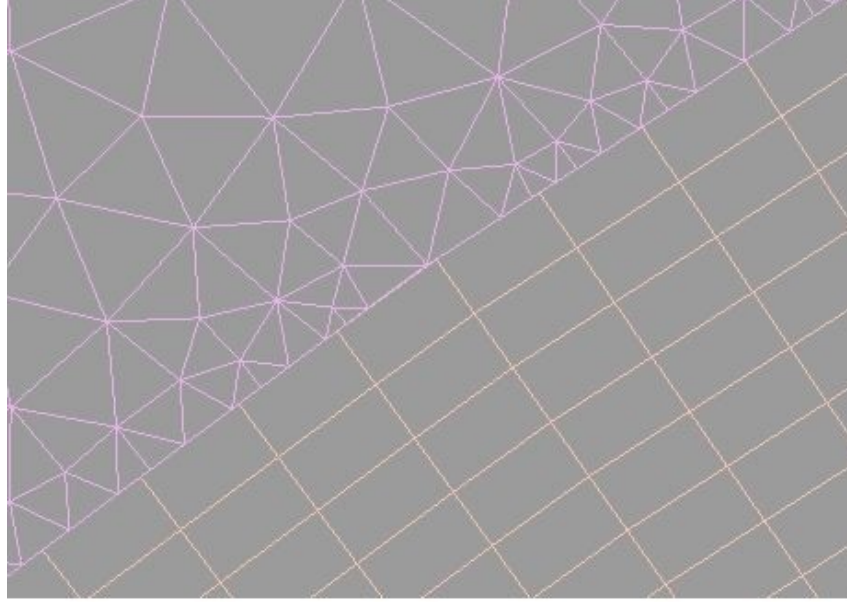


FIGURE 1.11 – Interface non conforme [35].

Dissymétrie : Lorsque le vecteur $P\vec{N}$ joignant le centre des cellules adjacentes à une face ne passe pas par le centre de la face f mais intersecte un autre point de cette face f_i , alors le vecteur $f\vec{f}_i = \mathbf{m}$ atteste l'existence d'une dissymétrie. Plus l'intensité Ψ de cette dissymétrie est importante, plus dans les cellules concernées, l'interpolation de valeurs depuis le centre de la cellule aux faces sera mauvaise (figure 1.13).

$$\Psi = \frac{|\mathbf{m}|}{|P\vec{N}|} \quad (1.7)$$

1.3.2 Maillage des lits catalytiques

Traitement de la géométrie

On considère trois types d'empilement de particules dans un récipient tubulaire (Table 1.2 et figure 1.14). Ces trois cas considérés permettront d'étudier l'influence de la taille et de la forme des particules sur la dynamique de l'écoulement et les transferts thermiques. Il a été par exemple montré [37]

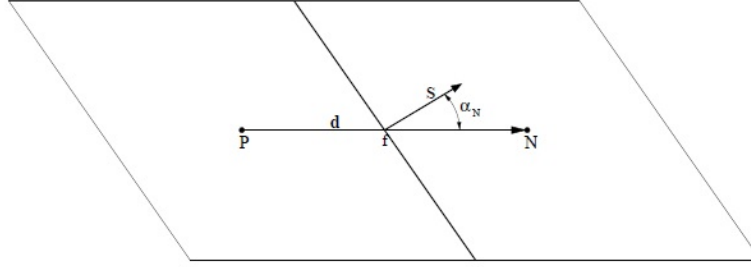


FIGURE 1.12 – L'orthogonalité [36].

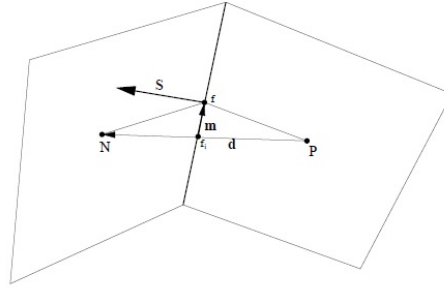


FIGURE 1.13 – La dissymétrie [36].

que c'est le rapport entre le diamètre du tube et le diamètre équivalent des particules N qui avait une influence sur la conductivité thermique effective λ_{eff} et le coefficient de transfert à la paroi Nu , plutôt que le diamètre des particules ou celui du tube. Pour estimer N lorsque la particule n'est pas sphérique on utilise le diamètre équivalent d_p qui dans le cas d'une sphère est égal au diamètre de celle-ci,

$$V = \frac{\pi}{6} d_p^3 \quad N = \frac{d_t}{d_p} \quad (1.8)$$

avec V le volume de la particule et d_t le diamètre du tube. La longueur des tubes est différente pour chaque cas étudié. En effet, plus la taille des particules empilées est grande et la forme complexe, plus il faut agrandir le domaine d'empilement afin qu'il y ait assez de particules pour atteindre la convergence statistique (voir Chapitre 2).

Cas	forme des particules	N	Longueur du tube (m)
1	sphérique	5	0.2
2	sphérique	10	0.1
3	cylindrique avec trous (pellets)	5	0.4

TABLE 1.2 – Caractéristiques des empilements.

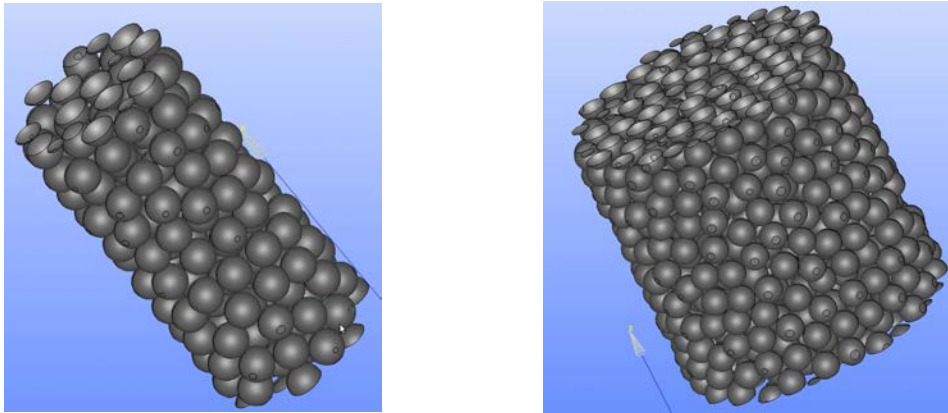


FIGURE 1.14 – Empilement aléatoire et périodique de sphères. Gauche : Cas 1, $N = 5$. Droite : Cas 2, $N = 10$.

De tels empilements présentent deux difficultés majeures à savoir la difficulté à générer le maillage et la difficulté à obtenir toutes les convergences depuis la convergence des résidus jusqu’à la convergence des VERs en passant par la convergence du maillage (voir Chapitre 2 et section 1.4). La principale contrainte rencontrée lors de la génération du maillage est la gamme d’échelles rencontrée. La tailles des pores que l’on peut rencontrer peut aller de 0 (points de contact) jusqu’à environ une taille avoisinant le diamètre des particules empilées d_p . Ces différentes échelles sont à priori aléatoirement réparties dans tout le domaine. Pour faire face à la variabilité de la taille des pores, on peut utiliser le raffinement local du maillage, ce qui permet d’avoir une forte densité de cellules dans les régions plus étroites et une densité moins importante ailleurs. Ceci a un impact sur l’uniformité du maillage, ce qui se traduit par la génération d’erreurs notamment lors d’estimation des termes de diffusion (Section 1.4). Mais la contrainte la plus difficile à gérer est le problème des points de contact. Lorsque deux sphères sont très proches, voire se touchent alors dans ces zones on peut rencontrer des cellules de très mauvaise qualité. Dans de telles cellules, la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l’énergie n’est pas obtenue. Au fil des itérations l’écart entre la solution vérifiant les équations de conservation et la solution obtenue dans ces cellules se creuse, les erreurs de discrétisation continuent à croître et le calcul finit par diverger. Une des solutions consiste à éviter les zones très étroites. Il est possible par exemple de diminuer ou d’augmenter la taille de toutes les particules d’un petit δr . Mais il a été montré [38] que les modifications globales (diminution ou augmentation du diamètre des particules de 1%) induisent des erreurs importantes sur l’estimation de la porosité et de la perte de charge (environ 4% sur la porosité et 12 – 15% sur la perte de charge). Ainsi, il est conseillé de préférer des stratégies de modification locale à celles qui sont basées sur des modifications globales.

Ici, la stratégie retenue consiste à évaluer la distance séparant les particules et à appliquer une modification locale dès lors que la distance séparant deux particules est inférieure à une distance seuil prédéterminée d_s . On s’assure ainsi que la distance minimale séparant les particules est au-dessus de d_s . La modification locale se fait de la façon suivante : lorsqu’une particule ayant une distance inférieure ou égale à d_s avec une autre est détectée, on agrandit la particule de $4d_s$. Autrement dit, le rayon de la nouvelle particule est maintenant égal à $r_{new} = r + 2d_s$. La nouvelle particule va chevaucher un certain nombre de voisines. On retranche alors chez ces voisines les parties qui recouvrent la nouvelle particule. La nouvelle particule reprend ensuite ses di-

mensions initiales (figure 1.15). Quant aux points de contact particule-tube, ceux-ci sont traités avec la même approche : on crée un nouveau cylindre dont le rayon est inférieur de 0.4% au rayon du tube. Les zones de particules se trouvant à l'extérieur du cylindre sont éliminées. En corrigeant ainsi les pores trop étroits, on s'assure de ne pas trouver de mailles de très mauvaise qualité à l'intérieur du domaine.

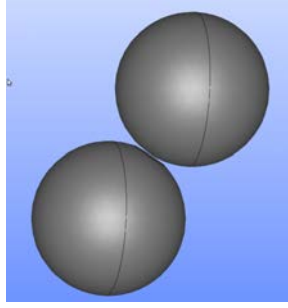


FIGURE 1.15 – Traitement local de la géométrie pour s'affranchir des points de contact et des pores trop étroits.

Maillage du domaine fluide

La très grande complexité de la géométrie exclut d'office la possibilité de générer un maillage structuré. Le domaine est pavé à l'aide de tétraèdres uniquement. La génération du maillage s'est faite avec l'algorithme NETGEN proposé par le logiciel Open Source SALOME. Le maillage obtenu est ensuite exporté en format .unv pour ensuite être converti en .msh via OpenFoam pour qu'il puisse être lu par le logiciel de calcul ANSYS Fluent. Les faces d'entrée et de sortie sont ensuite reliées par périodicité non conforme.

Les figures 1.16, 1.17 et 1.18 évaluent la qualité du maillage en se basant sur quatre critères à savoir la déviation du volume, la déviation angulaire, l'orthogonalité et la valeur de y^+ . Avec ANSYS Fluent, la déviation du volume est évaluée comme suit,

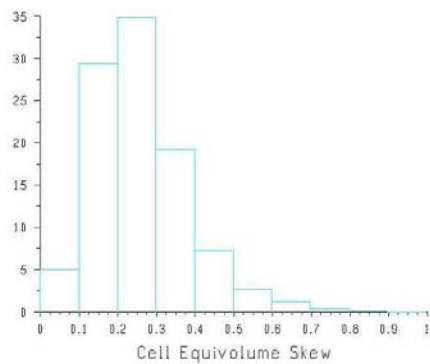
$$\delta_v = \frac{V_{\text{cellule équilatérale}} - V_{\text{cellule}}}{V_{\text{cellule équilatérale}}} \quad (1.9)$$

avec $V_{\text{cellule équilatérale}}$ le volume du tétraèdre régulier dont les sommets se trouvent sur la surface du sphère contenant les sommets de la cellule de

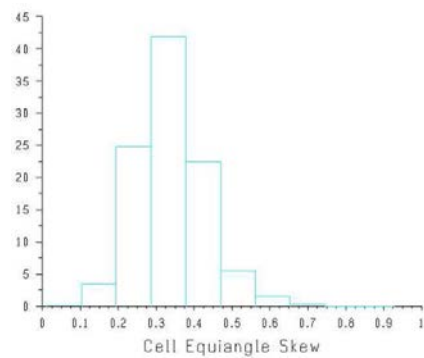
notre maillage V_{cellule} . La qualité est d'autant meilleure que δ_v est proche de zéro. Si δ_v est égale à l'unité, tous les noeuds de la cellule sont coplanaires et la cellule est complètement dégénérée. La déviation angulaire est mesurée comme suit,

$$\delta_\theta = \text{Max}[\frac{\theta_{\max} - \theta_{eq}}{180 - \theta_{eq}}, \frac{\theta_{\min} - \theta_{eq}}{\theta_{eq}}] \quad (1.10)$$

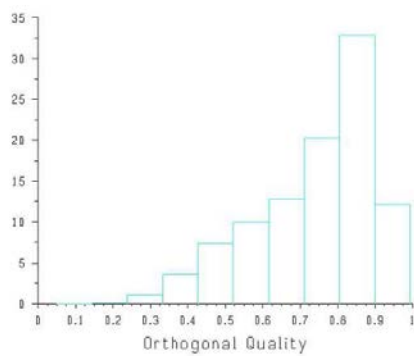
avec θ_{eq} l'angle du tétraèdre régulier alors que $\theta_{\max}$ et $\theta_{\min}$ sont les angles maximum et minimum de notre cellule. La qualité est d'autant meilleure que δ_θ est proche de zéro. L'orthogonalité δ_O est évaluée en estimant le cosinus de l'angle α_N (voir la figure 1.12). La qualité est d'autant meilleure que δ_O est proche de l'unité.



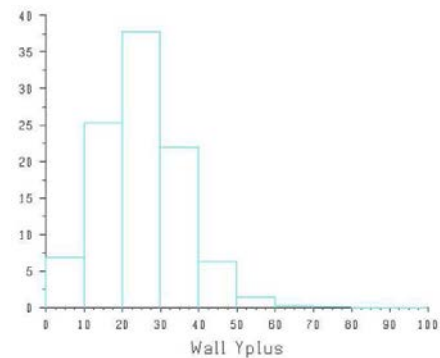
(a) Déviation du volume



(b) Déviation angulaire

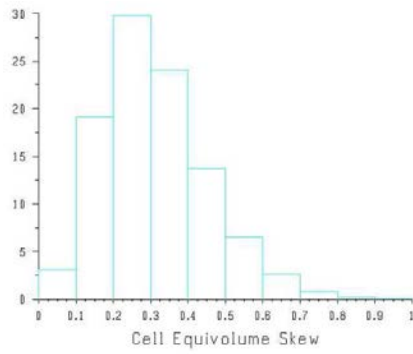


(c) Orthogonalité

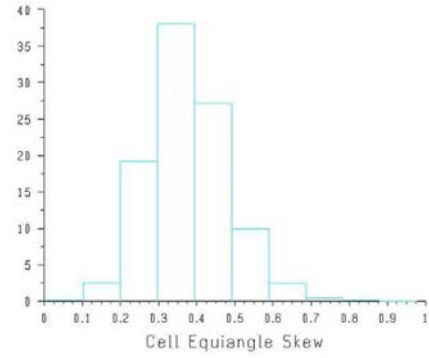


(d) Répartition des y^+

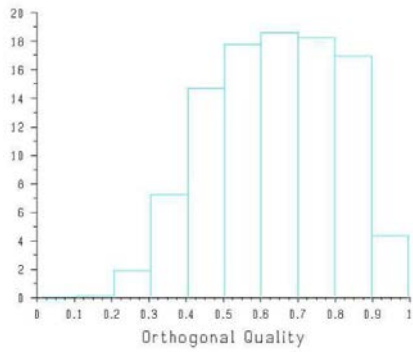
FIGURE 1.16 – Cas 1 : Évaluation de la qualité du maillage.



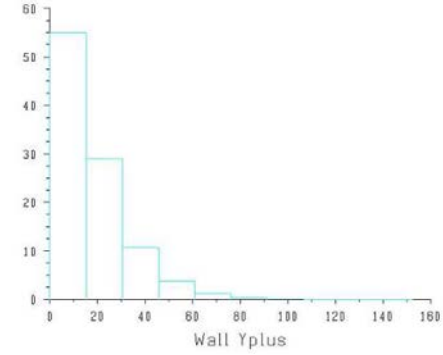
(a) Déviation du volume



(b) Déviation angulaire

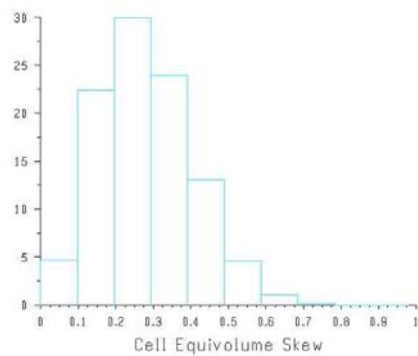


(c) Orthogonalité

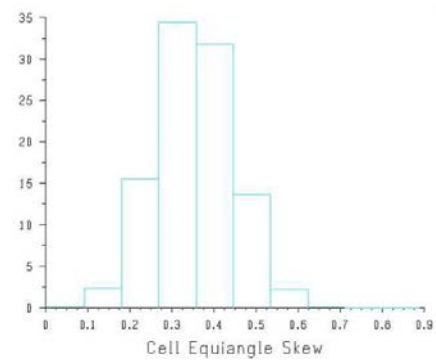


(d) Répartition des y^+

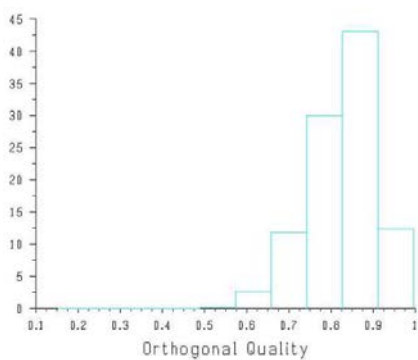
FIGURE 1.17 – Cas 2 : Évaluation de la qualité du maillage.



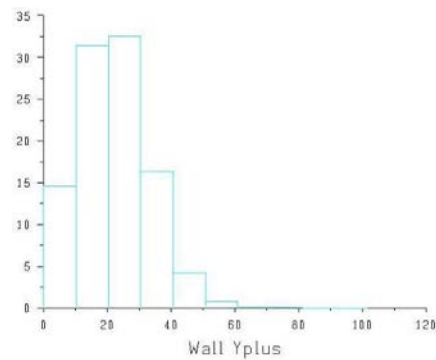
(a) Déviation du volume



(b) Déviation angulaire



(c) Orthogonalité



(d) Répartition des y^+

FIGURE 1.18 – Cas 3 : Évaluation de la qualité du maillage (maillage obtenu avec le logiciel Distene).

1.4 Etape 3 : le calcul

Les équations aux dérivées partielles sont des équations continues. Lors d'une résolution numérique les solutions ne sont calculées que sur un ensemble fini de points du domaine considéré. Ces solutions discrètes convergent de plus en plus vers la solution continue avec l'accroissement du nombre de points sur lesquels les solutions sont connues. Pour que cette condition soit vérifiée, tout code de calcul prétendant résoudre des problèmes aux EDP doit vérifier systématiquement les propriétés suivantes.

Consistance : L'erreur de discrétisation doit diminuer avec le raffinement du maillage. Ainsi, la différence entre la solution exacte et la solution numérique peut être exprimée comme étant proportionnelle au pas de discrétisation à la puissance m , avec m un entier positif. La solution numérique est d'autant plus précise que m est grand, m pouvant être associé à l'ordre d'approximation.

Stabilité : L'erreur de discrétisation doit diminuer avec l'avancement du calcul. Autrement dit, ces erreurs ne doivent pas être amplifiées par l'algorithme de résolution choisi.

Conservation : Les grandeurs conservées par l'EDP continue doivent aussi être conservées par la formulation discrète (Conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie).

1.4.1 Équations de conservation

Les équations aux dérivées partielles continues que nous résolvons ici sont une modélisation de la réalité. Les équations de Navier-Stokes incompressibles par exemple décrivent le mouvement collectif des molécules composant le fluide. On définit un volume élémentaire fluide représentatif du mouvement d'ensemble. Ce volume contient statistiquement un même nombre de molécules mais pas forcément les mêmes au cours de son déplacement. Ses dimensions sont assez petites pour que les grandeurs le caractérisant (vitesse, température) puissent être considérées ponctuelles mais assez grandes (supérieures devant la distance intermoléculaire ou devant le libre parcours moyen) pour appliquer le formalisme du milieu continu. Le mouvement chaotique à l'intérieur du volume fluide ainsi que les échanges de particules entre volumes fluides sont quant à eux modélisés par la notion de viscosité μ , de pression P et de température T . Les équations de conservation de la masse et de la quantité de mouvement ci-dessous décrivent le mouvement des par-

ticules fluides incompressibles à l'échelle mésoscopique.

$$\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j) = 0 \quad (1.11)$$

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial}{\partial x_i}P + \frac{\partial}{\partial x_j}\bar{\tau} \quad (1.12)$$

où le tenseur des contraintes s'écrit,

$$\bar{\tau} = \mu \left[\left(\frac{\partial}{\partial x_j} u_i + \frac{\partial}{\partial x_i} u_j \right) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x_i} u_i \right] \quad (1.13)$$

avec u_i les composantes du vecteur vitesse, P la pression, ρ la masse volumique et μ la viscosité moléculaire.

La conservation de l'énergie est représentée par l'équation suivante,

$$\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho C_p u_j T) = \frac{\partial}{\partial x_j}(\lambda_f \frac{\partial}{\partial x_j} T) \quad (1.14)$$

avec T , C_p et λ_f , respectivement la température, la capacité calorifique massique et la conductivité thermique du fluide considéré.

1.4.2 Modèle de Turbulence [39, 40]

Les équations de Navier-Stokes décrivent le mouvement instantané des particules fluides dans un domaine donné, en donnant à chaque instant t et en chaque point $\mathbf{x}$ de l'espace le vecteur vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. En posant $\overline{u_i(\mathbf{x}, t)}$, la moyenne temporelle de la composante i du champ $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ en un point $\mathbf{x}$ de l'espace, le champ instantané peut être décomposé suivant,

$$u_i(\mathbf{x}, t) = \overline{u_i(\mathbf{x}, T)} + u'_i(\mathbf{x}, t) \quad (1.15)$$

avec $\overline{u_i(\mathbf{x}, T)}$ la moyenne de la composante i du vecteur vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ des différentes particules fluides ayant traversé le point situé en $\mathbf{x}$ sur une période temporelle T choisie tel que $1/T$ soit très petit par rapport à la fréquence caractéristique des fluctuations de $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. Cela revient à mettre en place une bande passante qui ne laisse passer que les basses fréquences.

$$\overline{u_i(\mathbf{x}, T)} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} u_i(\mathbf{x}, t) dt \quad (1.16)$$

u_i' est la déviation temporelle de moyenne nulle. Cette décomposition est communément appelée la décomposition de Reynolds. En appliquant la moyenne temporelle à (1.11) et (1.12),

$$\overline{\frac{\partial}{\partial x_j} u_j} = 0 \quad (1.17)$$

$$\overline{\frac{\partial u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i u_j)} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\overline{P}}{\rho} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \overline{u_i} \quad (1.18)$$

et en utilisant la décomposition de Reynolds (1.15), on obtient les équations RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes) incompressibles gouvernant le champ moyen du vecteur vitesse.

$$\frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u_j} = 0 \quad (1.19)$$

$$\frac{\partial \overline{u_i(\mathbf{x}, T)}}{\partial T} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i u_j}) = -\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\overline{P}}{\rho} + \nu \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} \overline{u_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \overline{u_i' u_j'} \quad (1.20)$$

Lorsque la moyenne temporelle de la vitesse ne varie plus au cours du temps en tout point $\mathbf{x}$ de l'espace ($\frac{\partial \overline{u_i(\mathbf{x}, T)}}{\partial T} = 0$), ces équations décrivent la répartition du champ de vitesse dans l'espace en régime stationnaire. Alors, $\overline{u_i(\mathbf{x})}$ peut être vu comme étant la moyenne statistique de la composante i de $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ des particules fluides passant par $\mathbf{x}$.

$$\overline{u_i(\mathbf{x})} = \frac{1}{T} \int_0^{T \rightarrow \infty} u_i(\mathbf{x}, t) dt \quad (1.21)$$

En multipliant (1.12) par u_i , en prenant ensuite sa moyenne temporelle et en retranchant (1.20) à l'expression obtenue, on obtient l'équation gouvernant l'énergie des fluctuations du champ de vitesse.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} k \overline{u_j} = -\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\overline{P' u_j'}}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_j'} \right] + \nu \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} k - \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \epsilon \quad (1.22)$$

où $k = \frac{\overline{u_i' u_i'}}{2}$ est l'énergie cinétique turbulente, $\epsilon = \nu \frac{\partial u_i'}{\partial x_j} \frac{\partial u_i'}{\partial x_j}$ le taux de dissipation visqueuse.

L'équation d'évolution exacte du taux de dissipation étant complexe à modéliser, il a été construit une équation de façon artificielle dont la justification ne repose que sur l'analogie à l'équation gouvernant l'énergie cinétique turbulente et sur l'analyse dimensionnelle. L'équation postulée s'écrit,

$$\frac{D}{Dt}\epsilon = Production - Destruction + Diffusion \quad (1.23)$$

$\frac{D}{Dt}$ étant la dérivée particulaire. Le terme de production et celui de destruction s'écrivent par un raisonnement dimensionnel,

$$Production - Destruction = \frac{\epsilon}{k}(C_{\epsilon 1}P_k - C_{\epsilon 2}\epsilon) \quad (1.24)$$

avec P_k le terme de production d'énergie cinétique turbulente venant de (1.22). Ayant supposé la proportionnalité entre l'évolution de k et de ϵ comme suit,

$$\frac{1}{k} \frac{D}{Dt}k \propto \frac{1}{\epsilon} \frac{D}{Dt}\epsilon \Rightarrow \frac{D}{Dt}\epsilon \propto \frac{\epsilon}{k} \frac{D}{Dt}k \quad (1.25)$$

les coefficients $C_{\epsilon 1}$ et $C_{\epsilon 2}$ servent à corriger d'éventuelles différences entre la dynamique de k et celle de ϵ . On utilise l'hypothèse de Boussinesq pour fermer l'équation (1.22),

$$-\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\frac{\overline{P'u'_j}}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j} \right] \approx \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) \quad (1.26)$$

avec σ_k le nombre de Prandtl associé à l'énergie cinétique turbulente et ν_t la viscosité turbulente qui s'écrit,

$$\nu_t = c_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (1.27)$$

Les équations fermées décrivant les fluctuations turbulentes s'écrivent finalement,

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho k \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \mu_t S^2 - \rho \epsilon \quad (1.28)$$

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \epsilon \bar{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_{\epsilon 1} \mu_t \frac{\epsilon}{k} S^2 - C_{\epsilon 2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} \quad (1.29)$$

avec σ_ϵ , le nombre de Prandtl associé au taux de dissipation et S_{ij} le tenseur de déformation,

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.30)$$

Pour réaliser les calculs d'écoulement 3D à l'intérieur des tubes catalytiques avec le logiciel ANSYS Fluent, on utilisera la version réalisable du modèle $k - \epsilon$ (voir documentation Fluent) plutôt que le modèle standard décrit plus haut. Ce modèle, en reformulant la viscosité turbulente avec un C_μ variable, garantit certaines propriétés mathématiques telles que l'inégalité de Schwarz pour les contraintes de cisaillement et la positivité du cisaillement normal. De plus, une nouvelle équation d'évolution pour le taux de dissipation ϵ est proposée pour tenter de corriger le modèle standard. Les modifications apportées ont montré des améliorations notables pour les écoulements présentant des champs de vitesse avec d'importantes courbures, des tourbillons et des zones de recirculation.

$$\frac{\partial \rho \epsilon}{\partial t} + \nabla_j (\rho \epsilon \overline{u_j}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\epsilon} \right) \frac{\partial \epsilon}{\partial x_j} \right] + C_1 \rho S \epsilon - C_2 \rho \frac{\epsilon^2}{k + \sqrt{\nu \epsilon}} \quad (1.31)$$

avec

$$C_1 = \max \left[0.43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right], \quad \eta = S \frac{k}{\epsilon} \quad (1.32)$$

Les coefficients du modèle sont $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\epsilon = 1.2$, $C_2 = 1.9$.

1.4.3 Loi de paroi[39, 41, 42, 43]

Nous traitons ici des écoulements turbulents à travers un milieu dans le quel la présence de parois est très importante. Le mécanisme et la dynamique des écoulements pariétaux présentent un caractère qualitativement universel dans la région très proche de la paroi. En effet, Un écoulement en présence de paroi doit satisfaire la nullité du vecteur vitesse à la paroi (adhérence à la paroi) alors que la vitesse du fluide loin de la paroi est non nulle. La couche limite peut être vue comme une zone de raccord dans laquelle le fluide passe de façon continue de sa vitesse non nulle loin des parois à zéro sur la paroi, donnant lieu ainsi à un cisaillement. Le cisaillement intensifie l'anisotropie de l'écoulement (pour satisfaire l'incompressibilité du fluide, une structure turbulente se dirigeant dans la direction normale à la paroi va redistribuer sa quantité de mouvement dans les autres directions lorsqu'elle va venir taper la paroi) et produit de l'énergie cinétique (terme de production dans l'équation de l'énergie cinétique turbulente). De plus, la variation de la vitesse en s'éloignant de la paroi entraîne en même temps la variation du nombre de Reynolds qui va passer de zéro à une valeur très grande devant un, montrant ainsi que le poids respectifs des effets de la viscosité et des effets

inertiels non linéaires vont aussi varier dans la couche limite en fonction de la distance à la paroi. A partir du frottement pariétal τ ,

$$\tau = \mu \frac{d\bar{u}}{dy} \Big|_{paroi} \quad (1.33)$$

on peut définir une vitesse de frottement,

$$\bar{u}_\tau = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}} \quad (1.34)$$

avec lequel on construit une longueur caractéristique pertinente qui servira à adimensionner la distance à la paroi dans la couche limite.

$$y^+ = \frac{y\bar{u}_\tau}{\nu} \quad (1.35)$$

La couche limite se développant sur une paroi d'épaisseur δ est caractérisée par des mécanismes physiques qui varient en fonction de la distance à la paroi. On peut toutefois identifier des zones bien définies dans lesquelles la dynamique de l'écoulement présente une certaine universalité (Tableaux 1.3 et 1.4). La zone tampon est particulièrement complexe puisque les effets visqueux sont aussi importants que les effets inertiels. Elle diffère des autres régions en étant excédentaire sur le plan énergétique. En effet, elle se caractérise par une production supérieure à la dissipation contrairement aux autres régions qui détruisent plus d'énergie qu'elles en produisent. Le maximum de production se trouve quelque part dans cette zone. La production de turbulence dans cette zone peut être expliquée par l'existence de structures cohérentes telles que des tourbillons longitudinaux et des streaks. Les streaks sont des jets longitudinaux allongés, sinueux et robustes avec une vitesse longitudinale instantanée qui peut être soit très rapide ou très lente par rapport à la vitesse moyenne au même endroit. On distingue de cette façon les streaks rapides des streaks lents. Les streaks rapides sont par exemple responsables de l'augmentation du frottement local instantané dans les écoulements turbulents. Ces structures côtoient des tourbillons longitudinaux orientés légèrement vers l'extérieur de la couche limite et localisés près des parois. Il a été confirmé que ces deux types de structures cohérentes forment un cycle de génération mutuelle. Par effet d'entraînement, les tourbillons longitudinaux donnent naissance à des streaks : en aspirant du fluide vers la paroi, les tourbillons apportent dans la couche limite du fluide avec

une quantité de mouvement supérieure à celle existant sur place donnant ainsi naissance à de streaks rapides. De même, en éjectant du fluide à faible quantité de mouvement depuis la paroi vers l'extérieur, des streaks lents sont créés. Cependant, la façon dont les streaks créent des tourbillons reste encore à éclaircir. Ceci étant, il est démontré que le système composé d'un streak et de deux tourbillons longitudinaux forment un cycle auto entretenu et que ce cycle est localisé essentiellement dans la région tampon ($10 \leq y^+ \leq 60$). En effet, il a été observé que lorsque l'on isolait cette zone de tout échange avec les autres zones de la couche limite, le cycle continuait à exister et à perdurer. L'analyse des spectres des fluctuations de la vitesse longitudinale montre l'existence de streaks pour tout nombre de Reynolds, notamment dans la zone interne. Mais elle révèle aussi l'existence de structures de grande taille (de l'ordre de l'épaisseur de la couche limite ou du diamètre du conduit) localisées essentiellement dans la zone logarithmique et de structures de très grande taille qui sont des dizaines de fois plus grandes que les structures de grandes tailles. Il a été montré que contrairement à ce que l'on pouvait penser, ces structures de grande et très grande taille possèdent 40 – 65% de l'énergie cinétique turbulente et génèrent 30 – 50% des fluctuations croisées $\overline{u'v'}$. L'activité de ces structures de grandes et très grandes tailles s'intensifie avec le nombre de Reynolds montrant que l'énergie cinétique turbulente n'est pas monopolisée dans les structures cohérentes de petites tailles (streaks et tourbillons longitudinaux) mais que la dynamique globale est beaucoup plus complexe car les structures de grandes tailles apparaissent sous la forme d'ondulations latérales de paquets de petites structures. Une loi de paroi empirique proposée par Thompson pour la région interne s'écrit,

$$\bar{u}^+(y^+) = \begin{cases} y^+ & y^+ < 4 \\ 4.19 - 5.75\ln y^+ + 5.11\ln^2 y^+ - 0.767\ln^3 y^+ & 4 \leq y^+ < 30 \\ \frac{1}{\kappa}\ln y^+ + 5.45 & y^+ \geq 30 \end{cases}$$

avec κ la constante de Von Karman (voir figure 1.19).

Dans la région externe, le profil de la vitesse moyenne est généralement donné par une loi déficitaire,

$$\frac{\bar{u}_\infty - \bar{u}(y)}{\bar{u}_\tau} = \Psi(\zeta), \quad \zeta = \frac{y}{\delta} \quad (1.36)$$

En effectuant un développement asymptotique raccordé (DAR), on s'aperçoit

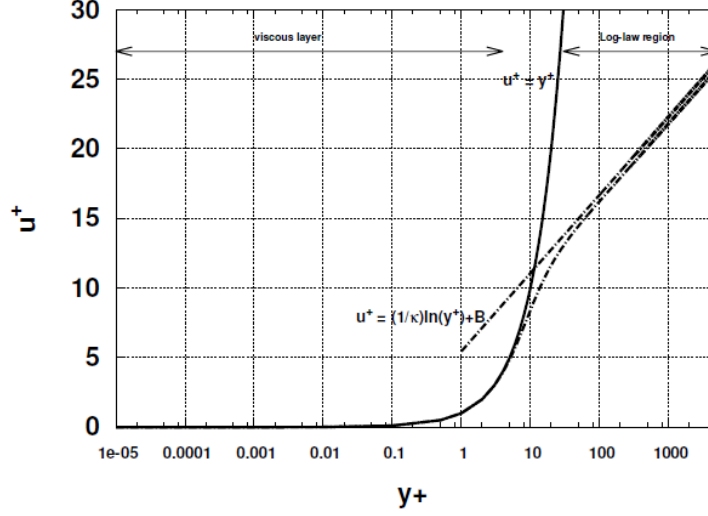


FIGURE 1.19 – Loi de paroi proposée par Thompson.

que la condition suivante doit être satisfaite par la fonction $\Psi(\zeta)$.

$$\lim_{\zeta \rightarrow 0} \Psi(\zeta) = -\frac{1}{\kappa} \ln \zeta + B \quad (1.37)$$

On peut retenir la formule proposée par Coles (1956),

$$\Psi(\zeta) = -\frac{1}{\kappa} \ln \zeta - \mathcal{W} \quad (1.38)$$

avec

$$\mathcal{W} = \frac{\Pi(x)}{\kappa} [1 - \cos(\pi \zeta)] \quad (1.39)$$

où $\Pi(x)$ est le coefficient de sillage. Une formulation du profil complet de la vitesse moyenne peut être obtenue.

$$\frac{\bar{u}(y)}{\bar{u}_\tau} = (\text{solution interne}) + (\text{solution externe}) - f_{rac} \quad (1.40)$$

où la fonction de raccord f_{rac} s'écrit,

$$f_{rac} = \lim_{y^+ \rightarrow \infty} (\text{solution interne}) = \lim_{\zeta \rightarrow 0} (\text{solution externe}) \quad (1.41)$$

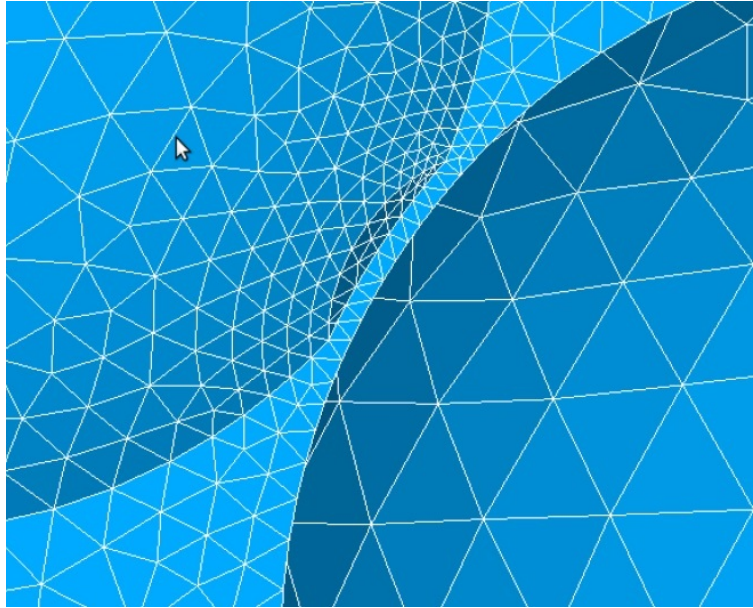


FIGURE 1.20 – maillage des zones proches paroi avec des tétraèdres.

On obtient finalement,

$$\frac{\bar{u}(y)}{\bar{u}_\tau} = \bar{u}^+(y^+) + \mathcal{W} \quad (1.42)$$

S'agissant de la dynamique de la température dans la couche limite, elle est pilotée par la diffusion moléculaire et la diffusion turbulente normales à

Zone	Sous Zone	étendue	$\bar{u}(y)$
Interne	Sous-couche visqueuse	$0 \leq y^+ \leq 3 - 5$	$\bar{u}^+ = y^+$
	Zone tampon	$3 - 5 \leq y^+ \leq 30 - 50$	loi empirique
	Zone logarithmique	$30 - 50 \leq y^+ \leq 0.1\delta^+$	$\bar{u}^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C_1$
Externe	Zone logarithmique	$30 - 50\nu/\bar{u}_\tau \leq y \leq 0.1\delta$	$\bar{u} = \frac{1}{\kappa} \ln(y/h) + C_2$
	Sillage	$y \geq 0.1\delta$	loi empirique

TABLE 1.3 – Les différentes zones de la couche limite.

Sous Zone	Bilan énergétique simplifié
Sous-couche visqueuse	dissipation = diffusion visqueuse
Zone tampon	production = dissipation + diffusion turbulente
Zone logarithmique	production = dissipation
Zone logarithmique	production = dissipation
Sillage	diffusion turbulente = dissipation

TABLE 1.4 – Bilan énergétique dans les différentes zones de la couche limite.

la paroi.

$$\lambda \frac{d\bar{T}(y)}{dy} - \overline{v'T'} = q_w \quad (1.43)$$

avec λ et q_w la conductivité moléculaire et le flux à la paroi. Dans la sous-couche diffusive collée à la paroi, la diffusion turbulente est négligeable et le profil de température prend une forme simple en apparence.

$$T^+(y^+, Pr) = Pr y^+ \quad T^+ = \frac{\bar{T}(y) - \bar{T}_w}{T^*} \quad (1.44)$$

où T^* est la température de frottement.

$$T^* = \frac{q_w}{C_p \rho u_\tau} \quad (1.45)$$

En effet, la complexité vient de l'épaisseur de la sous-couche diffusive qui dépend du nombre de Prandtl Pr . Pour $Pr \sim 1$, l'épaisseur de la couche thermique diffuse est de même ordre que l'épaisseur de la sous-couche visqueuse. Mais pour $Pr \gg 1$, son épaisseur est plus mince que celle de la couche visqueuse et à l'inverse pour $Pr \ll 1$, elle est plus épaisse et recouvre une partie de la couche logarithmique.

La zone logarithmique thermique délimite quant à elle la zone où la diffusion moléculaire est négligeable devant la diffusion turbulente. Le profil de température s'écrit,

$$\frac{\bar{T}(y)}{T^*} = \frac{1}{\kappa_\theta} \ln(y^+) + B \quad (1.46)$$

avec κ_θ , la constante de Von Karman pour le scalaire passif. La présence de structures cohérentes influence la dynamique du scalaire passif. Les zones de forte valeur q_w à la paroi sont corrélées avec les streaks rapides. Les structures cohérentes agissent tels de micro-mélangeurs naturels qui améliorent le transfert de chaleur à la paroi.

La loi de paroi utilisée pour réaliser les calculs 3D dans les lits catalytiques est la loi de paroi améliorée proposée par Fluent [44]. C'est une méthode qui résout l'écoulement jusque dans la couche laminaire dans les zones où le maillage est très fin ($y^+ \approx 1$) mais utilise une loi de paroi dans les zones présentant un maillage plus grossier. C'est particulièrement intéressant pour la configuration géométrique que nous considérons. En effet, la taille des pores étant variable, le type d'écoulement rencontré près des parois des particules peuvent varier d'un endroit à l'autre. Certaines configurations des particules peuvent donner lieu à des mouvements de recirculations, d'autres à des jets de fluide. Dans les zones proche paroi ayant à faire à différents types d'écoulements, la vitesse de frottement sera déterminée par l'écoulement local impliquant ainsi un y^+ différent dans tout le domaine (figures 1.16d, 1.17d, 1.18d). Cette distribution non homogène de y^+ engendrée par la physique de l'écoulement peut ensuite être amplifiée (ou atténuée) par la taille des cellules bordant la surface des particules. Le maillage étant réalisé qu'avec des cellules tétraédriques dont la densité locale est paramétrée par l'étroitesse des pores, il faut s'attendre à un maillage assez raffiné près des parois formant des pores étroits alors que les parois côtoyant les pores de " grande taille " seront bordées de cellules de taille plus grande (figure 1.20). La méthode combinant loi de paroi et modèle à deux couches semble pouvoir mieux estimer les différents champs proche paroi dans tout le domaine qu'une loi de paroi standard.

En définissant un nombre de Reynolds turbulent $Re_y \equiv \frac{\rho\sqrt{k}y}{\mu}$, avec y la distance séparant le centre des cellules à la paroi la plus proche, on identifie les zones affectées par la viscosité par $Re_y < 200$ des zones complètement turbulentes où le modèle $k - \epsilon$ est utilisé pour traiter la turbulence. Dans la région affectée par la viscosité, la turbulence est traitée par un modèle à une équation de Wolfstein [45]. La viscosité turbulente dans cette région s'écrit $\mu_{t,2layer} = \rho C_\mu l_\mu \sqrt{k}$ avec $l_\mu = y C_l (1 - e^{-Re_y/A_\mu})$ [46], $C_l = \kappa C_\mu^{3/4}$, et $A_\mu = 70$. La viscosité turbulente dans tout le domaine s'écrit alors $\mu_{t,tot} = \lambda_\epsilon \mu_t + (1 - \lambda_\epsilon) \mu_{t,2layer}$ avec λ_ϵ une fonction de raccord s'écrivant $\lambda_\epsilon = \frac{1}{2} [1 + \tanh(\frac{Re_y - 200}{A})]$. De même le taux de dissipation dans la zone affectée par la viscosité est donné par $\epsilon = \frac{k^{3/2}}{l_\epsilon}$ avec $l_\epsilon = y C_l (1 - e^{-Re_y/2C_l})$. En fonction de y^+ , la loi de paroi est ajustée,

$$u^+ = e^\Gamma u_{lam}^+ + e^{1/\Gamma} u_{turb}^+ \quad (1.47)$$

avec la fonction de coupure $\Gamma = -\frac{0.01(y^+)^4}{1+5y^+}$ définie par Kader [43]. De même,

$$\frac{du^+}{dy^+} = e^\Gamma \frac{du_{lam}^+}{dy^+} + e^{1/\Gamma} \frac{du_{turb}^+}{dy^+} \quad (1.48)$$

avec $\frac{du_{turb}^+}{dy^+} = \frac{1}{\kappa y^+}$ et $\frac{du_{lam}^+}{dy^+} = 1$. En utilisant la même approche,

$$T^+ \equiv \frac{(T_w - T_p)\rho c_p u_T}{q} = e^\Gamma T_{lam}^+ + e^{1/\Gamma} T_{turb}^+ \quad (1.49)$$

avec $\Gamma = -\frac{0.01(Pr y^+)^4}{1+5Pr^3 y^+}$, $\dot{q}$ le flux thermique à la paroi, T_p la température au centre de la première cellule bordant la paroi, u_T la vitesse dans la sous-couche thermique et Pr le nombre de Prandtl. La température dans la couche laminaire est donnée par la loi,

$$T_{lam}^+ = Pr(u_{lam}^+ + \frac{u_* \rho}{2\dot{q}} u^2) \quad (1.50)$$

et la loi de paroi au-dessus de la couche laminaire s'écrit,

$$\begin{aligned} T_{turb}^+ = Prt [u_{turb}^+ + 9.24((\frac{Pr}{Prt})^{3/4} - 1)(1 + 0.2e^{-0.007Pr/Prt}) \\ + \frac{\rho u_*}{2\dot{q}}(u^2 - (\frac{Pr}{Prt} - 1)(u_c^+)^2(u_*^+)^2)] \end{aligned} \quad (1.51)$$

avec Prt le nombre de Prandtl turbulent et u_c^+ la vitesse dans la zone tampon.

1.4.4 Résolution discrète des équations de conservation

Méthode des volumes finis

Chaque cellule représente un volume de contrôle dans lequel les lois de conservation de masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie énoncées ci-dessus doivent être satisfaites. La forme générale de ces équations de conservation ou équations de transport dans un volume de contrôle s'écrit en régime stationnaire sous la forme ci-dessous

$$\underbrace{\int_{V_c} \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u} \psi) dV}_{convection} - \underbrace{\int_{V_c} \vec{\nabla} \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi) dV}_{diffusion} = \underbrace{\int_{V_c} S_\psi dV}_{Source} \quad (1.52)$$

où ψ est une variable générale qui peut être la température, les composantes du vecteur vitesse, l'énergie cinétique turbulente ou encore le taux de dissipation. V_c est le volume de contrôle et Γ_ψ le coefficient de diffusion de la quantité ψ . Tous les termes qui peuvent apparaître dans une équation de transport peuvent être finalement représentés sous forme de diffusion, de convection et de terme source. Le terme source regroupe tous les termes qui ne s'écrivent pas sous forme d'une divergence et s'interprète comme étant une production ou une destruction effective de la quantité ψ . L'équation (1.52) est discrétisée dans chaque volume de contrôle suivant la méthode des volumes finis. Cette méthode est très populaire car elle est conservative par nature et son utilisation est indépendante des éléments géométriques choisis (tétraèdres par exemple) pour discrétiser le domaine et de la façon dont cette discrétisation s'est opérée (structuré ou non structuré). En utilisant le théorème de flux-divergence, la forme intégrale de l'équation (1.52) s'écrit,

$$\oint_{S_c} d\mathbf{S} \cdot (\rho \vec{u} \psi) - \oint_{S_c} d\mathbf{S} \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi) = \int_{V_c} S_\psi dV \quad (1.53)$$

avec S_c , la surface délimitant le volume de contrôle et $d\mathbf{S}$, le vecteur normal associé à chaque élément de surface dS . L'équation (1.53) est ensuite discrétisée à l'intérieur de chaque volume de contrôle. L'annexe A repasse en revue les différentes sources d'erreur qui surgissent lors de la discrétisation d'équations de type (1.53). Elle souligne aussi le rôle déterminant joué par la qualité du maillage sur la précision de la solution calculée. Il est en effet important de relier les différentes erreurs générées lors de la discrétisation des équations à leurs sources pour concrètement comprendre pourquoi il est plus utile d'insister sur la qualité du maillage que sur la précision des schémas de discrétisation.

Schémas de discrétisation

Pour évaluer les gradients au centre des cellules, la méthode choisie dans ANSYS Fluent est celle des moindres carrées. La variation de la variable dépendante entre deux cellules voisines s'écrit,

$$(\nabla \psi)_{c0} \cdot \Delta r_i = (\psi_{ci} - \psi_{c0}) \quad (1.54)$$

avec ψ_{c0} et $(\nabla \psi)_{c0}$, la valeur de la variable et de son gradient au centre de la cellule $c0$, ψ_{ci} la valeur de la variable au centre d'une cellule voisine ci et Δr_i ,

la distance séparant le centre de chacune de ces deux cellules. En prenant en compte toutes les cellules qui entourent la cellule $c0$, (1.54) devient

$$[J](\nabla\psi)_{c0} = \Delta\psi \quad (1.55)$$

où J est une matrice qui ne dépend que de la forme géométrique des cellules. En utilisant la méthode de projection de Gram-Schmidt pour décomposer les coefficients de la matrice J , chaque composante du gradient de la variable dépendante au centre de la cellule $c0$ s'écrit,

$$(\nabla_j\psi)_{c0} = \sum_{i=1}^n W_{i0}^j \cdot (\psi_{ci} - \psi_{c0}) \quad (1.56)$$

avec n le nombre de cellules voisines à $c0$ et W_{i0}^j la projection du vecteur Δr_i dans la direction j . Pour discrétiser les équations de la turbulence (1.28) et (1.31), on utilise un schéma décentré en amont du premier ordre. ANSYS Fluent estime que la valeur au centre de la cellule étant la valeur moyenne dans la cellule, cette valeur est la même en tout point du volume, y compris sur la face. Ce faisant, le schéma décentré en amont du premier ordre se lit selon ANSYS $\psi_f = \psi_{c0}$, où ψ_{c0} est la valeur au centre de la cellule se trouvant en amont de la face f . La discrétisation des équations de conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie s'est faite par un schéma décentré en amont d'ordre deux.

$$(\nabla_j\psi)_f = \psi_{c0} + (\nabla\psi)_{c0} \cdot \Delta r \quad (1.57)$$

où $c0$ est la cellule se trouvant en amont de la face f . Le gradient au centre de la cellule est évaluée par la méthode des moindres carrées décrite ci-dessus. Le système linéaire à résoudre en mettant en évidence le terme de Pression est,

$$a_p\psi = \sum_n a_n\psi_n + \sum P_f \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} + b \quad (1.58)$$

où la valeur de la pression sur le centre de la face est donnée par le schéma standard.

$$P_f = \frac{\frac{P_{c0}}{a_{p,c0}} + \frac{P_{c1}}{a_{p,c1}}}{\frac{1}{a_{p,c0}} + \frac{1}{a_{p,c1}}} \quad (1.59)$$

Partant du lien qui existe entre la condition d'incompressibilité du fluide et du rôle de la pression pour assurer cette condition, le couplage vitesse-

pression est réalisé avec une approche dite de prédiction-correction.

$$\nabla_j(\rho v_j) = 0 \Rightarrow \oint \rho \vec{v} \cdot d\vec{A} = 0 \Rightarrow \sum_f^{N_{faces}} \rho_f v_f A_f = 0 \quad (1.60)$$

où v_f est la vitesse à travers la face f interpolée depuis la valeur de vitesse sauvegardée au centre des cellules $c0$ et $c1$ adjacentes à la face.

$$\rho_f v_f = \rho_f \frac{a_{P,c0} v_{n,c0} + a_{P,c1} v_{n,c1}}{a_{P,c0} + a_{P,c1}} + d_f [P_{c0} - P_{c1} + (\vec{\nabla} P)_{c0} \cdot \vec{r}_0 - (\vec{\nabla} P)_{c1} \cdot \vec{r}_1] \quad (1.61)$$

P_{c0} , P_{c1} et $v_{n,c0}$, $v_{n,c1}$ sont respectivement les pressions et les vitesses normales sauvegardées au centre des cellules $c0$ et $c1$. Les coefficients de pondérations a_P sont ceux utilisés dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement (1.58). d_f enfin est une fonction de a_P . Nous utilisons l'algorithme SIMPLE implémenté dans le solveur ANSYS Fluent pour obtenir le champ de pression. On pose $\rho_f v_f = J_f$. L'équation de la conservation est premièrement résolue avec une valeur arbitraire du champ de pression P^* . Le flux à travers les faces obtenu par l'équation (1.61) ne satisfait pas l'équation de la continuité (1.60). Au flux calculé J_f^* , on apporte une correction J'_f pour que le flux ainsi corrigé satisfasse la continuité.

$$J_f = J_f^* + J'_f \quad (1.62)$$

où $J'_f = d_f [P'_{c0} - P'_{c1}]$ avec P'_{ci} la correction apportée à la pression au centre de la cellule ci . En réécrivant l'équation de la continuité discrétisée (1.61) avec la décomposition (1.62), on en déduit l'équation régissant le terme correctif de la pression,

$$a_P P' = \sum_n a_n P'_n + b \quad (1.63)$$

où $b = \sum_f^{N_f} J_f^* A_f$. La solution de l'équation (1.63) permet d'obtenir la pression à l'intérieur des cellules et les flux surfaciques J_f qui cette fois-ci satisfont l'équation de la continuité.

$$P = P^* + \alpha_P P' \quad (1.64)$$

$$J_f = J_f^* + d_f [P'_{c0} - P'_{c1}] \quad (1.65)$$

avec α_P , le facteur de sous-relaxation.

Algorithme de résolution

Résoudre des EDP à l'état stationnaire revient à résoudre un système d'équations à N équations où N s'obtient en faisant le produit du nombre de cellules par le nombre de variables dépendantes.

$$A\psi + \mathbf{b} = 0 \quad (1.66)$$

où A est une matrice $N \times N$. Lorsque ce système d'équation n'est pas linéaire, on procède d'abord à la linéarisation de celui-ci pour obtenir un système linéaire comme suit,

$$a_P\psi_P = \sum_n a_n\psi_n + b \quad (1.67)$$

où a_p et a_n sont respectivement les coefficients linéarisés au centre de la cellule P et au centre des cellules voisines à la cellule P . Lorsque le nombre d'équations N est très important (très courant en CFD), on a souvent recours à des méthodes itératives pour résoudre le système linéaire. En effet, les méthodes directes (la décomposition LU, élimination de Gauss ou même l'algorithme Thomas) sont inadaptées pour de grands systèmes comme le nombre d'opérations requises explosent avec N . Il en est de même avec la demande en mémoire qui évolue comme N^2 . Toutefois, la plupart des méthodes itératives implémentées dans les solveurs existants exige que la matrice A soit diagonalement dominante pour garantir la convergence. Il faut donc s'assurer que la magnitude du terme diagonal soit supérieure ou égale à la somme de la magnitude des termes non diagonaux se trouvant sur la même ligne.

$$\forall i \in [1, n], |a_{i,i}| \geq \sum_{j \neq i}^n |a_{i,j}| \quad (1.68)$$

Il est possible d'augmenter la dominance des termes diagonaux en jouant sur les facteurs de sous-relaxation associés à chaque variable dépendante. Le facteur de sous relaxation a pour rôle de contrôler la variation de ψ entre itérations successives.

$$\psi^i = \psi^{i-1} + \alpha \Delta\psi \quad (1.69)$$

avec α le facteur de sous-relaxation et $\Delta\psi$ la variation de ψ entre l'itération $i - 1$ et i . Le système linéaire avec facteur de relaxation s'écrit,

$$\frac{a_P\psi^i}{\alpha} = \sum_n a_n\psi_n^i + b + \frac{1 - \alpha}{\alpha} a_P\psi^{i-1} \quad (1.70)$$

Le système linéaire ci-dessus est résolu en utilisant la méthode de Gauss-Seidel avec l'algorithme AMG (voir la documentation Fluent pour plus de détail).

Convergence des résidus

A chaque itération, le résidu d'une inconnue ψ est évaluée comme étant l'écart de la solution calculée à la solution exacte donnée par (1.67).

$$R^\psi = \frac{\sum_{cell} |\sum_n a_n \psi_n + b - a_P \psi_P|}{\sum_{cell} |a_P \psi_P|} \quad (1.71)$$

On s'assurera que la valeur des résidus soit très petite (inférieure à 10^{-3} pour les composantes de la vitesse et les variables turbulentes et inférieure à 10^{-6} pour l'énergie). Ce critère est très important mais insuffisant car il faut souvent le compléter en vérifiant par ailleurs que la conservation des différents flux est respectée (écart très inférieur à 1%). Même si la convergence des résidus est atteinte (critères énoncés ci-dessus vérifiés) il faut toutefois s'assurer que des valeurs pertinentes du problème (température à la paroi par exemple) ne varient plus au cours des itérations.

1.4.5 Convergence en maillage

Les erreurs de discrétisation et d'interpolation sont comme nous venons de voir plus haut des fonctions de la taille des mailles (voir annexe A). Autrement dit, raffiner un maillage permet de diminuer ces erreurs. Cependant, la question qui peut être soulevée est de savoir quelle est la plus petite taille de maille à partir de la quelle on peut considérer que les erreurs de discrétisation sont négligeables. Il n'est souvent pas possible de savoir à l'avance la taille optimale des mailles dans les différentes régions du domaine, notamment lorsque la géométrie est très complexe et/ou que le maillage est non structuré. En effet, comme il a été montré plus haut, l'erreur de discrétisation dépend aussi de la solution et de ses dérivées qui sont des inconnues du problème. Une méthode pratique de s'assurer que les erreurs de discrétisation sont négligeables est de raffiner le maillage existant et de comparer la solution obtenue avec le nouveau maillage à la solution obtenue avec l'ancien. Si la différence entre les deux solutions est inférieure à un critère que l'on a fixé (erreur acceptable), on considère que la convergence en maillage est obtenue.

Dans le cas contraire, on raffine de nouveau le maillage et ainsi de suite jusqu'à ce que la différence entre les solutions calculées sur deux raffinements de maillage successifs soit inférieure au critère prédéfini. La solution vérifiant la convergence en maillage est considérée indépendante du maillage (raffiner davantage n'affecte plus la solution (voir la figure 1.21)). Comme nous nous intéressons dans la suite aux profils radiaux des quantités moyennées spatialement et temporellement, il paraît naturel de vérifier la convergence en maillage pour ces profils doublement moyennés (Chapitre 2, section 2.3.3).

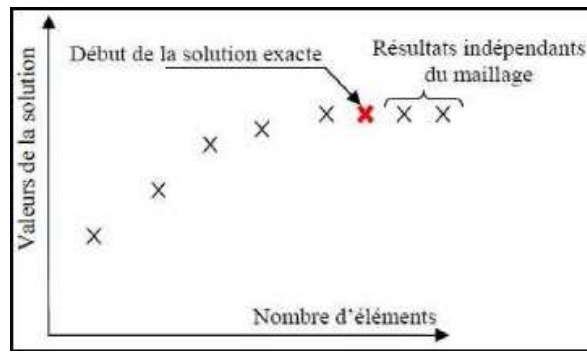


FIGURE 1.21 – La convergence en maillage [47].

1.5 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre détaillé les différentes étapes que comprend la chaîne numérique tout en dénichant les différentes sources d'erreurs qui prennent naissance d'une part sur les hypothèses de simplifications, les approximations, les modèles et d'autre part sur les compromis réalisés pour faire face aux contraintes pratiques. La base de données générée et considérée comme étant de référence sera par conséquent entachée par ces différentes sources d'erreurs. Les foyers d'erreurs qu'il aurait fallu contrôler au mieux existent à chaque étape de la chaîne (empilement peu dense, maillage exclusivement tétraédrique, modèle de turbulence (voir annexe B)).

Cependant, nous verrons dans les chapitres suivants que la base de donnée permet de dégager des informations physiques pertinentes. En effet, comme il sera montré ci-dessous les transferts radiaux sont complètement dominés par des mécanismes dispersives et non par des mécanismes turbulents. Les erreurs faites sur les quantités turbulentes prennent alors un poids beaucoup moins important à l'échelle macroscopique. De plus les mécanismes physiques mis en évidence ont une portée générale, c'est-à-dire que même s'ils ont été décrits et formalisés pour un milieu idéalisé, ce sont ces mêmes mécanismes qui pilotent les transferts radiaux dans les milieux réels. Ce faisant, les conclusions dégagées lors de cette étude permettent néanmoins d'enrichir et de compléter la connaissance que nous avons des milieux réels.

Chapitre 2

Concept de moyenne volumique

Sommaire

2.1	Introduction	60
2.2	Moyenne volumique	60
2.3	Équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à l'échelle macroscopique	63
2.3.1	Équations de Navier-Stokes incompressibles à l' échelle macroscopique	63
2.3.2	Équation de conservation de l'énergie	64
2.3.3	Convergence en maillage des quantités doublement moyennées	65
2.4	Volume Élémentaire Représentatif (VER) . . .	67
2.4.1	Concept de Volume Élémentaire Représentatif . .	67
2.4.2	Volume Élémentaire Représentatif (VER) dans un milieu périodique [49, 50]	67
2.4.3	Volume élémentaire représentatif dans un milieu isotrope infini [49, 50]	68
2.5	Volume élémentaire représentatif adapté aux lits catalytiques	69
2.5.1	VER tubulaire	69
2.5.2	Validation numérique	70
2.6	Conclusion	80

2.1 Introduction

Les simulations numériques 3D nous donnent des informations sur les champs de vitesse et de température à l'échelle du pore (espace entre les particules solides) dans les lits catalytiques. Cependant, on n'a pas forcément besoin d'avoir des informations concernant directement ces échelles. En effet, les observations expérimentales se font à des échelles bien supérieures et les grandeurs d'intérêt pour les systèmes que l'on étudie ne sont pertinents qu'à l'échelle de l'observation. Il est donc nécessaire d'effectuer un changement d'échelle pour transporter l'information caractéristique de l'échelle du pore à l'échelle macroscopique.

La question qui se pose alors est de savoir comment effectuer des prises de moyenne volumique pour reconstituer un champ moyen à l'échelle d'observation qui soit représentatif des échelles microscopiques. Il faut pour cela définir et formaliser une méthode de prise de moyenne qui va faire participer le champ local à la formation d'un champ moyen dont le rôle est de représenter les échelles microscopiques à l'échelle d'observation de façon univoque. L'objectif est ainsi d'éviter les différentes interprétations qualitatives et quantitatives que l'on pourrait faire lors du changement d'échelle. Des critères de convergence ayant pour rôle d'assurer une unique interprétation des données locales à l'échelle d'observation seront définis et numériquement vérifiés dans ce chapitre. Ceci nous permettra de s'assurer que le champ moyen que nous allons étudier à l'échelle d'observation est bien représentatif du champ local et que les mécanismes physiques effectifs pilotant le champ moyen dérivent de lois physiques bien plus fondamentales (équations de Navier-Stokes gouvernant le champ local).

2.2 Moyenne volumique

Nous allons définir ici l'opérateur moyenne volumique $\langle \cdot \rangle$ à l'aide de la théorie des distributions [48]. Pour ce faire, prenons un milieu poreux (domaine $\mathcal{D}$) saturé en fluide et appelons α la phase fluide et β la phase solide. Soit la fonction de Heaviside repérant la phase α définie comme suit,

$$\forall \mathbf{x} \in \mathcal{D}, \quad H(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & \mathbf{x} \in \alpha \\ 0 & \mathbf{x} \notin \alpha \end{cases} \quad (2.1)$$

La dérivée de l'équation (2.1) s'écrit,

$$\frac{dH(\mathbf{x})}{dx_i} = -\mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{e}_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha\beta}) \quad (2.2)$$

où $\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\alpha\beta})$ est la fonction de Dirac avec $\mathbf{x}_{\alpha\beta}$ la position de l'interface séparant la phase α de la phase β et $\mathbf{n}_\alpha$ le vecteur normal à l'interface pointant vers l'extérieur de la phase α . La moyenne volumique d'un champ ψ défini dans la phase α , peut être exprimée de la façon suivante,

$$\langle \psi_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \int_V \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.3)$$

où V est le volume total ($V = V_\alpha + V_\beta$) et $\mathbf{x}$ le vecteur position repérant le centre du volume V . Puisque ψ est nul dans la phase β , l'équation (2.3) devient,

$$\langle \psi_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \int_{V_\alpha} \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.4)$$

Il est aussi utile de définir la moyenne intrinsèque à la phase α ,

$$\langle \psi_\alpha \rangle^\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{V_\alpha(\mathbf{x})} \int_{V_\alpha} \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.5)$$

En comparant (2.4) et (2.5), on en déduit l'expression de la porosité $\phi_\alpha(\mathbf{x})$, c'est-à-dire la proportion de la phase α dans le volume V .

$$\langle \psi_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \phi_\alpha(\mathbf{x}) \langle \psi_\alpha \rangle^\alpha(\mathbf{x}) \quad (2.6)$$

avec

$$\phi_\alpha(\mathbf{x}) = \frac{V_\alpha(\mathbf{x})}{V} = \frac{1}{V} \int_V H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.7)$$

En utilisant (2.2) et (2.7), on en déduit,

$$\nabla_i \phi_\alpha(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \int_V \nabla_i H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.8)$$

$$= -\frac{1}{V} \int_V \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{e}_i \delta(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi} - \mathbf{x}_{\alpha\beta}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.9)$$

$$= -\frac{1}{V} \int_{S_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{e}_i dS \quad (2.10)$$

En appliquant la moyenne volumique définie par l'équation (2.3) au gradient du champ ψ il vient,

$$\langle \nabla_i \psi_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \frac{1}{V} \int_V \nabla_i \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.11)$$

$$= \frac{1}{V} \int_V \nabla_i [\psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi})] d\boldsymbol{\xi} - \frac{1}{V} \int_V \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) \nabla_i H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \quad (2.12)$$

$$= \frac{1}{V} \int_V \nabla_i [\psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi})] d\boldsymbol{\xi} + \frac{1}{V} \int_{S_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{e}_i \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) dS \quad (2.13)$$

En posant V indépendant de $\mathbf{x}$ (volume constant) et que les bords du volume sont périodiquement liés,

$$\frac{1}{V} \int_V \nabla_i [\psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi})] d\boldsymbol{\xi} = \nabla_i \left[\frac{1}{V} \int_V \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) H(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi} \right] \quad (2.14)$$

(2.11) s'écrit finalement,

$$\langle \nabla_i \psi_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \nabla_i [\phi_\alpha(\mathbf{x}) \langle \psi_\alpha \rangle^\alpha(\mathbf{x})] + \frac{1}{V} \int_{S_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_\alpha \cdot \mathbf{e}_i \psi(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) dS \quad (2.15)$$

De même, la divergence du champ ψ s'écrit,

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\psi}_\alpha \rangle(\mathbf{x}) = \nabla \cdot [\phi_\alpha(\mathbf{x}) \langle \boldsymbol{\psi}_\alpha \rangle^\alpha(\mathbf{x})] + \frac{1}{V} \int_{S_{\alpha\beta}} \mathbf{n}_\alpha \cdot \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}) dS \quad (2.16)$$

Tout champ local instantané ψ peut être décomposé en une moyenne volumique et une fluctuation comme suit,

$$\psi(\mathbf{x}) = \langle \psi \rangle^\alpha(\mathbf{x}) + \delta\psi(\mathbf{x}) \quad (2.17)$$

La moyenne volumique du champ ψ est donnée par (2.5). Lorsque le volume choisi est représentatif du milieu (voir Section 2.4), alors il vient,

$$\langle \delta\psi(\mathbf{x}) \rangle^\alpha = 0 \quad (2.18)$$

L'annulation de la moyenne volumique des moments d'ordre 1 permet de confirmer la séparation d'échelle entre le champ moyen et le champ instantané

local. Il est aussi utile de rappeler que l'opérateur moyenne volumique est appliqué sur des champs moyennés dans le temps (champs RANS). Or étant donné que le milieu considéré n'évolue pas au cours du temps, le volume $V(\mathbf{x})$ est indépendant du temps ce qui implique la commutativité entre les opérateurs moyenne temporelle et moyenne volumique,

$$\langle \bar{\psi} \rangle(\mathbf{x}) = \overline{\langle \psi \rangle}(\mathbf{x}) \quad (2.19)$$

En appliquant la décomposition temporelle puis la décomposition spatiale à un champ ψ on trouve,

$$\psi = \langle \bar{\psi} \rangle^\alpha + \langle \psi' \rangle^\alpha + \delta \bar{\psi} + \delta \psi' \quad (2.20)$$

En appliquant de nouveau l'opérateur moyenne volumique puis l'opérateur moyenne temporelle (ou l'opérateur moyenne temporelle d'abord, l'opérateur moyenne volumique ensuite) à (2.20) on peut montrer que les trois derniers termes du second membre s'annulent comme l'exige la séparation des échelles.

2.3 Équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie à l'échelle macroscopique

Nous allons ici dériver les équations macroscopiques décrivant la dynamique d'un écoulement turbulent en régime stationnaire transportant un scalaire passif (chaleur) dans des lits catalytiques confinés à l'intérieur d'un tube. Dans la suite la moyenne volumique réalisée à l'intérieur du VER sera notée $\langle \cdot \rangle^v$ et la moyenne volumique réalisée à l'intérieur de la phase fluide du VER (moyenne intrinsèque) sera notée $\langle \cdot \rangle^i$.

2.3.1 Équations de Navier-Stokes incompressibles à l'échelle macroscopique

On applique la moyenne volumique aux équations RANS (1.19) et (1.20) en régime stationnaire.

$$\langle \nabla_j \bar{u}_j \rangle^v = 0 \quad (2.21)$$

$$\langle \nabla_j \bar{u}_i \bar{u}_j \rangle^v = -\nabla_i \frac{\bar{P}}{\rho} + \nu \nabla_j^2 \bar{u}_i - \nabla_j \overline{u'_i u'_j} \rangle^v \quad (2.22)$$

En utilisant les règles de décomposition et les propriétés liées à l'application de la moyenne volumique, on obtient :

$$\nabla_j(\phi\langle\bar{u}_j\rangle^i) = 0 \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} 0 = & \nabla_j[-\phi\langle\bar{u}_j\rangle^i\langle\bar{u}_i\rangle^i + \nu\nabla_j(\phi\langle\bar{u}_i\rangle^i) - \delta_{ij}\phi\frac{\langle\bar{P}\rangle^i}{\rho} + \phi\langle R_{ij}\rangle^i - \phi\langle\delta\bar{u}_i\delta\bar{u}_j\rangle^i] \\ & + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j\bar{u}_in_jdS - \frac{1}{V} \int Pn_idS \end{aligned} \quad (2.24)$$

avec $\langle R_{ij}\rangle^i$ le tenseur de Reynolds macroscopique, $-\langle\delta\bar{u}_i\delta\bar{u}_j\rangle^i$ la dispersion et $\frac{\nu}{V} \int \nabla_j\bar{u}_in_jdS - \frac{1}{V} \int Pn_idS$ les forces de trainée créées par la présence de la matrice solide et s'opposant à l'écoulement. On voit ainsi que ces équations font apparaître des moments d'ordre deux (corrélations temporelles et spatiales en un point) et des termes surfaciques qui doivent être modélisés afin d'obtenir des équations macroscopiques fermées.

2.3.2 Équation de conservation de l'énergie

On considère ici que les propriétés du fluide sont indépendantes de la température et qu'il n'y a aucun échange thermique entre la phase solide et la phase fluide. Cette dernière condition est réalisée en considérant que la surface de toutes les particules solides sont adiabatiques. On applique la moyenne temporelle puis la moyenne volumique à (1.14) et on obtient l'équation gouvernant le transport turbulent de la chaleur à l'échelle macroscopique par la phase fluide en régime stationnaire.

$$\begin{aligned} 0 = (\rho C_p)_f \frac{\partial}{\partial x_i} \Big[-\phi\langle\bar{u}_i\rangle^i\langle\bar{T}\rangle^i + -\phi[\langle\delta\bar{u}_i\delta\bar{T}\rangle^i + \langle\bar{u}_i'\bar{T}'\rangle^i] \Big] + \\ \frac{\partial}{\partial x_i} \Big[(\lambda_f\phi) \frac{\partial}{\partial x_i} \langle\bar{T}\rangle^i + \frac{1}{V} \int n_i\lambda_f\delta\bar{T}_f ds \Big] \end{aligned} \quad (2.25)$$

avec $-\langle\delta\bar{u}_i\delta\bar{T}\rangle^i$ et $-\langle\bar{u}_i'\bar{T}'\rangle^i$ respectivement la dispersion thermique et la diffusion turbulente à l'échelle macroscopique, $(\lambda_f\phi) \frac{\partial}{\partial x_i} \langle\bar{T}\rangle^i$ la diffusion moléculaire dans la phase fluide et $\frac{1}{V} \int n_i\lambda_f\delta\bar{T}_f ds$ la tortuosité. Les moments d'ordre deux et les termes surfaciques requièrent une modélisation.

2.3.3 Convergence en maillage des quantités doublement moyennées

Nous vérifions ici si les profils doublement moyennés sont indépendants de la densité du maillage. Les tableaux 2.1 et 2.2 évaluent l'erreur commise lorsque le nombre de maille est pratiquement doublé. On s'aperçoit que les moments d'ordre zéro tels que la température moyenne (figure 2.2) peuvent être considérés convergés. Cependant, les moments d'ordre deux tels que les corrélations dispersives et turbulentes affichent encore des erreurs relativement importantes (voir figure 2.1). Les erreurs sur les quantités turbulentes proviennent des zones proches parois qui sont très denses dans les types de milieux considérés. L'évaluation des quantités turbulentes en zone proche paroi avec des cellules tétraédriques n'est en effet pas la meilleure solution. On remarque notamment que le y^+ moyen est dans la zone tampon ce qui ne facilite pas la convergence (figures 1.16d, 1.17d, 1.18d).

Cas	Densité de cellules	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle T \rangle^i$	$\langle k_d \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_z \delta T \rangle^i$
1	27 861 365 à 50 817 851	0.18%	0.13%	1.17%	3.67%	0.69%
2	6 719 267 à 21 059 810	0.27%	0.34%	4.2%	8.3%	2.1%
3	22 417 828 à 42 524 271	0.16%	0.04%	0.28%	6.2%	0.5%

TABLE 2.1 – Erreur engendrée (en %) sur le profil radial des quantités doublement moyennées. $\langle k_d \rangle^i = \frac{1}{2} \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \rangle^i$ est l'énergie cinétique dispersive (voir chapitre 4).

Cas	Densité de cellules	$\langle k \rangle^i$	$\langle \epsilon \rangle^i$	$\langle \bar{u}'_z \bar{u}'_r \rangle^i$	$\langle \bar{u}'_r T' \rangle^i$
1	27 861 365 à 50 817 851	5.83%	7.04%	5.19%	8.47%
2	6 719 267 à 21 059 810	0.93%	6.6%	5.2%	8.5%
3	22 417 828 à 42 524 271	3.38%	2.54%	4.62%	2.36%

TABLE 2.2 – Erreur engendrée (en %) sur le profil radial des quantités turbulentes moyennées spatialement.

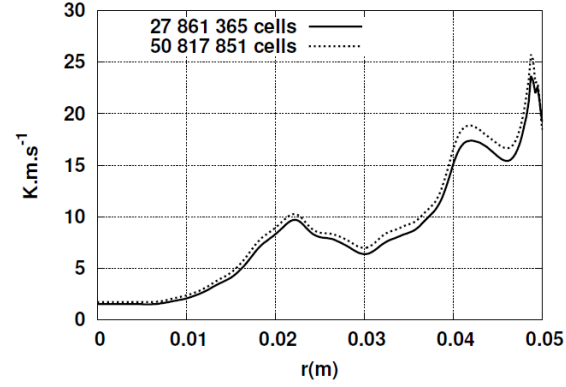


FIGURE 2.1 – L'influence de la densité de mailles sur le profil radial de la diffusion thermique turbulente $-\langle u'_r T' \rangle^i$ (Cas 1).

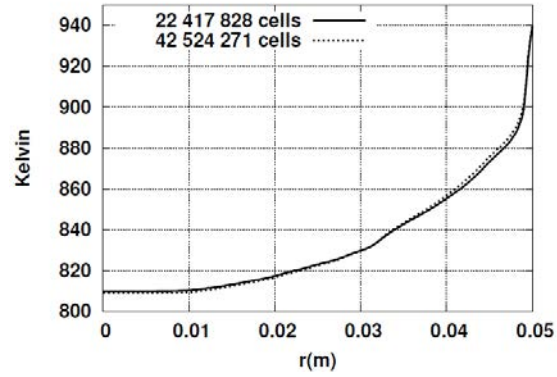


FIGURE 2.2 – L'influence de la densité de mailles sur le profil radial de la température moyenne, $\langle \bar{T} \rangle^i$ (Cas 3).

2.4 Volume Élémentaire Représentatif (VER)

2.4.1 Concept de Volume Élémentaire Représentatif

Nous avons ci-dessus évoqué les notions de moyenne volumique et de décomposition spatiale. Dans cette section nous allons expliciter les propriétés que doit satisfaire le volume dans lequel la moyenne est prise afin que la séparation d'échelle entre les variables moyennées et instantanées soit vérifiée ($\langle \delta\psi \rangle = 0$) et qu'ainsi les quantités moyennées aient un sens. Un tel volume appelé Volume Élémentaire Représentatif (VER) est le volume dans lequel la prise de moyenne doit être réalisée.

On peut définir le Volume Élémentaire Représentatif s'il existe, comme étant le plus petit motif du milieu considéré avec lequel on peut statistiquement reconstruire le milieu tout entier.

C'est très avantageux du point de vue numérique. En effet, au lieu de réaliser un calcul fin dans le milieu tout entier (ce qui est souvent non réalisable compte tenu des limites rencontrées en terme de temps de calcul et de ressources informatiques), il suffit de réaliser un calcul fin à l'intérieur de ce motif afin de déduire premièrement les propriétés effectives du milieu. En appliquant ensuite la moyenne volumique vue plus haut aux équations d'évolution des quantités qui nous intéressent (vitesse, température, concentration d'espèce), on en déduit des équations d'évolution filtrées par la taille du motif. Les influences des échelles sous-filtres sont modélisées par les propriétés déduites du calcul fin réalisé à l'intérieur du Volume Élémentaire Représentatif. Ce faisant, avec un nombre de mailles réduit, on est capable de résoudre les équations d'évolution des champs moyens (ou des variables filtrées) dans un milieu effectif et représentatif du milieu réel, ce qui peut être suffisant pour un grand nombre d'applications industrielles.

2.4.2 Volume Élémentaire Représentatif (VER) dans un milieu périodique [49, 50]

Considérons une rangée de carrés sur un plan infini (voir figure 2.3). Lorsque le milieu est périodique, le VER est le plus petit motif avec lequel tout le milieu peut être reconstruit. Des exemples de volume élémentaire représentatif d'un tel milieu sont représentés sur cette figure avec des bordures noires. Il est évident que le volume représenté avec des contours bleus

n'est pas un VER. On ne peut en effet reconstruire le milieu en répliquant périodiquement ce dernier motif.

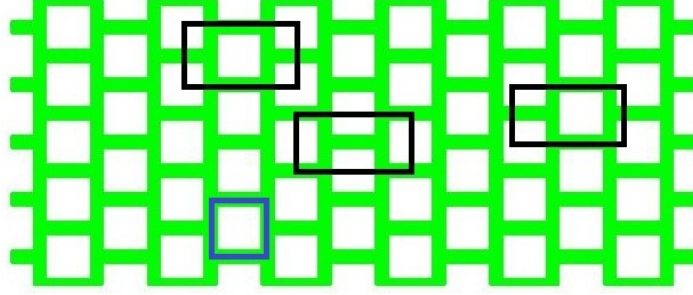


FIGURE 2.3 – VERs dans un milieu périodique

2.4.3 Volume élémentaire représentatif dans un milieu isotrope infini [49, 50]

Soit un milieu isotrope infini qui peut être un empilement aléatoire de particules dans un domaine non borné. Pour ce type de milieu, il est clair que le VER doit avoir une forme respectant la propriété d'isotropie. Ce faisant, la forme la plus adaptée est la forme sphérique. La longueur caractéristique L_{rev} du VER sphérique (son diamètre) doit être assez grande pour contenir assez de configurations différentes afin de pouvoir représenter statistiquement le milieu tout entier. Ceci implique,

$$L_{rev} \gg \text{MAX}\{l_p, l_{dp}\} \quad (2.26)$$

avec l_p et l_{dp} les longueurs caractéristiques de l'échelle du pore et des particules solides. Un tel VER est du point de vue statistique le motif avec lequel le milieu tout entier peut être reconstruit. Afin d'avoir une valeur numérique de L_{rev} , on part dans la pratique d'un volume sphérique de rayon r_0 relativement petit ($\approx \text{MAX}\{l_p, l_{dp}\}$) pour obtenir la moyenne d'une quantité d'intérêt $\langle \psi \rangle_{r_0}$. On augmente petit à petit le rayon du volume ($r_1 = r_0 + \Delta r, r_2 = r_0 + 2\Delta r \dots r_n = r_0 + n\Delta r$) et on trace le profil de $\langle \psi \rangle_{r_i}$ en fonction de r_i avec i allant de 0 à n . Tout comme pour la convergence en maille (figure 1.21), le rayon minimal r_{min} pour lequel on peut affirmer que le volume considéré est effectivement un VER est le rayon à partir duquel la

valeur moyenne $\langle \psi \rangle_{r_{min}}$ ne varie plus et tend vers un plateau. Autrement dit, prendre la moyenne de ψ dans un VER ayant un rayon plus grand que r_{min} ne changera pas la valeur de $\langle \psi \rangle_{r_{min}}$. Ainsi $L_{rev} = 2r_{min}$.

2.5 Volume élémentaire représentatif adapté aux lits catalytiques

2.5.1 VER tubulaire

Les empilements de particules dans des récipients tubulaires sont considérés homogènes dans les directions axiale et azimutale. Néanmoins, il faut bien noter que dans les empilement réels, notamment lorsque le rapport des diamètres tube-particule est relativement petit, des défauts d'empilement peuvent altérer ces hypothèses. Nous discuterons ci-dessous l'erreur engendrée par ces hypothèses et comment on peut y remédier. Cependant, ce qui est certain c'est que dans la direction radiale, l'empilement n'est pas homogène [51, 52]. Le profil de porosité radial illustre un comportement qualitativement semblable quelque soit la valeur du rapport des diamètres tube-particule N . En effet, la porosité est égale à un au contact de la paroi, elle diminue avec une pente assez raide en s'éloignant de la paroi jusqu'à environ $d_p/2$ où elle trouve son minimum local. Puis elle croît de nouveau, présentant ainsi un profil oscillant amorti de période avoisinant d_p . Lorsque N est relativement grand ($N \gg 10$), le profil de porosité tend vers un plateau constant à partir d'une distance d'éloignement d'environ $10d_p$ de la paroi (pour des empilements de sphères). Il est ainsi clair que c'est la présence de la paroi qui est responsable de l'inhomogénéité observée. Les empilements que nous considérons ($N \leq 10$) sont donc affectés par la présence de la paroi et l'inhomogénéité radiale persiste dans le domaine tout entier, notamment pour les empilements à faible N ($N \leq 5$) (figure 2.4).

La forme du volume élémentaire représentatif doit en effet épouser la symétrie de la géométrie. Ce faisant, la géométrie la plus adaptée pour les systèmes considérés est celle présentée sur la figure 2.5. En effet, la forme tubulaire du VER permet d'une part de s'affranchir de la dépendance angulaire et d'autre part de cerner l'inhomogénéité radiale tout en vérifiant la représentativité statistique du VER considéré (notamment la relation (2.14)). Pour ce faire, il faut cependant imposer certaines contraintes aux deux paramètres géométriques qui s'offrent à nous à savoir la longueur du VER dans

la direction axiale L et son épaisseur d . Premièrement, il faut s'assurer que le nombre de particules à l'intérieur du VER est suffisamment grand pour que toutes les configurations que l'on peut trouver dans l'intervalle $[r - \delta r; r + \delta r]$ soit statistiquement représentées. On pose ici $d = 2\delta r$. Utilisant l'hypothèse d'homogénéité de l'empilement dans la direction axiale, on peut atteindre la convergence statistique en vérifiant la condition (2.26) à chaque position radiale.

$$L(r) \gg \text{MAX}\{l_p(r), l_{dp}\} \quad \forall r \quad (2.27)$$

Quant à l'épaisseur d du VER il faut que celle-ci soit à la fois grande par rapport à l'échelle du pore l_p (séparation des échelles) et assez fine pour fidèlement capturer l'inhomogénéité radiale.

$$l_p \leq d \leq l_{ih} \quad (2.28)$$

avec l_{ih} , la longueur caractéristique de l'inhomogénéité.

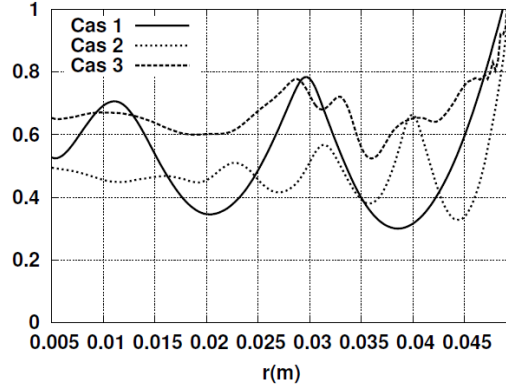


FIGURE 2.4 – Porosité radiale des empilements étudiés.

2.5.2 Validation numérique

Nous allons dans cette section vérifier la validité des critères énoncés plus haut et montrer que seuls les VERs respectant ces critères donneront lieu à des quantités moyennées qui auront qualitativement et quantitativement un sens à l'échelle d'observation. Nous allons premièrement éprouver le critère

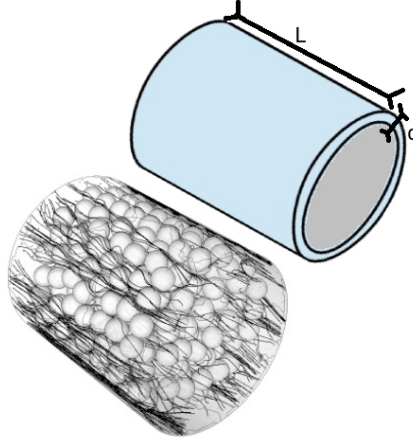


FIGURE 2.5 – VER approprié aux empilements aléatoires de particules dans des récipients tubulaires.

(2.28). Pour ce faire, prenons un VER de longueur L très grande (la longueur totale de l'empilement réalisé) et étudions l'influence de l'épaisseur d en prenant quatre différentes épaisseurs $d1, d2, d3$ et $d4$ vérifiant $d1 < d2 < d3 < d4$. Nous allons prendre la moyenne volumique d'un moment d'ordre deux à savoir la diffusion dispersive de la température $-\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$. En effet, il faut vérifier la validité des critères sur les moments d'ordre zéro tout comme sur les moments d'ordre deux. Comme il est toujours plus difficile de valider la convergence sur les moments d'ordre deux que sur les moments d'ordre zéro, nous avons choisi de présenter ici la validation des critères sur les moments d'ordre deux. En effet, l'épaisseur vérifiant (2.28) sur les moments d'ordre deux le vérifiera aussi pour les moments d'ordre zéro. On peut montrer que l'inverse est faux. On s'aperçoit sur la figure 2.6 que le profil radial de $-\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$ semble dépendre de l'épaisseur choisie. Regardons si les différentes épaisseurs vérifient (2.28). On peut noter que la moyenne réalisée avec un volume d'épaisseur $d1$ présente des fluctuations de taille caractéristique des échelles du pore. On en déduit $d1 < l_p$. Quant aux profils moyens obtenus avec des volumes d'épaisseur $d3$ et $d4$, ils ne se superposent pas au profil moyen obtenu avec le volume d'épaisseur $d1$ montrant ainsi que les épaisseurs $d3$ et $d4$ vérifient $d3, d4 > l_{ih}$. Finalement, seul le profil obtenu avec le volume d'épaisseur $d2$ se superpose parfaitement à celui obtenu avec le volume d'épaisseur $d1$ sans présenter de fluctuations caractéristique de l'échelle du

pore. De ce fait, on en déduit $l_p \leq d2 \leq l_{ih}$.

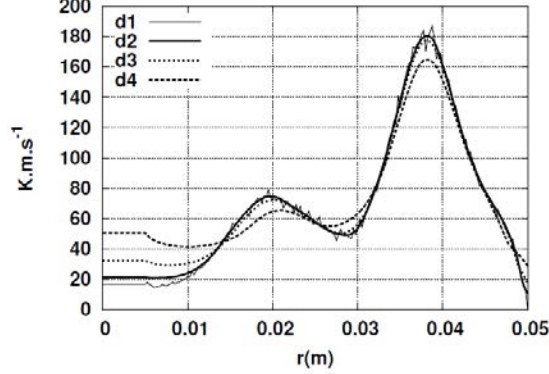


FIGURE 2.6 – Profil radial de la dispersion thermique $-\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$ pour différentes épaisseurs d du VER.

Regardons maintenant l'influence de la longueur L du VER sur le profil radial des quantités moyennées. L'erreur reportée sur les Tables 2.3, 2.4, 2.5, 2.6, 2.7 et 2.8 est calculée selon,

$$Error(\psi) = \frac{1}{R} \int_0^R dr 100 \left| \frac{\langle \psi_{i+1} \rangle(r) - \langle \psi_i \rangle(r)}{\langle \psi_{i+1} \rangle(r)} \right| \quad (2.29)$$

avec,

$$\langle \psi_i \rangle(r) = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \psi dV \quad V_i = 2\pi r \cdot (L_i) \cdot \underbrace{d2(r)}_{\frac{R}{r} \cdot d_0} \quad (2.30)$$

R est le rayon du tube et d_0 est l'épaisseur du VER côtoyant la paroi du tube. $d2(r)$ est l'épaisseur du VER respectant (2.28) et varie le long de la direction radiale pour en même temps conserver le volume V_i constant. Cela nous évite ainsi lors de la commutation de l'opérateur dérivée avec l'opérateur moyenne volumique de s'affranchir des termes de type $\nabla_r(1/V(r))$. Le VER est cylindrique au centre du tube.

L'erreur entre les quantités moyennées diminue fur et à mesure que l'on augmente la longueur du VER, L : le volume contenant de plus en plus de configurations d'empilement devient de plus en plus représentatif du milieu

le long de l'axe Z à chaque position radiale r . On s'aperçoit de plus qu'il faut une longueur L beaucoup plus grande pour atteindre la convergence statistique des moments d'ordre deux tels que les termes de diffusion turbulentes ou dispersives que pour les moments d'ordre zéro tels que la vitesse axiale. Pour le Cas 3 par exemple (figures 2.7, 2.8), l'erreur sur la vitesse axiale est inférieure à 1% dès que $L \geq 0.12$ m, alors que l'erreur sur les termes de diffusion turbulentes et dispersives ne descend pas sous la barre des 1% même lorsque $L = 0.4$ m.

La convergence statistique est très importante. Si elle n'est pas obtenue on peut avoir des profils radiaux non représentatif du milieu considéré. La figure 2.9 montre l'influence de la longueur L du volume utilisé pour faire les moyennes sur l'aspect qualitatif et quantitatif des quantités moyennées. On s'aperçoit que plus on s'approche de la convergence statistique (L grand) plus le profil radial de la quantité moyennée tend vers un profil convergé, c'est à dire vers un profil représentant fidèlement la quantité à chaque position radiale dans le milieu considéré. Il faut aussi noter que la convergence peut être rendue lente par la présence de défauts d'empilements (trous). Cela se voit notamment sur les moments dispersifs d'ordre deux, ces moments étant les plus vulnérables à ce type de défaut (figure 2.10). La faible compacité (Table 1.1) de l'empilement donne lieu à des poches de fluides venant perturber la convergence statistique. Il faut pour effacer ces défauts augmenter la longueur L du VER, ce qui peut ne pas se réaliser dans la pratique. En effet, cela revient à augmenter la taille du système, ce qui est limité par les contraintes des ressources informatiques. Il est plus judicieux de s'affranchir de ces défauts dès l'étape de l'empilement.

L_i à L_{i+1} (m)	ϕ	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle T \rangle^i$	$\langle k_d \rangle^i$	$\langle k \rangle^i$	$\langle \epsilon \rangle^i$
0.005 à 0.01	4.3%	4.2%	7.3%	10.2%	2.7%	6.9%
0.01 à 0.02	9.1%	7.9%	51.5%	11.6%	3.0%	8.6%
0.02 à 0.04	5.2%	3.7%	45.2%	10.2%	5.0%	7.1%
0.04 à 0.06	4.5%	2.9%	25.9%	7.9%	1.8%	4.3%
0.06 à 0.08	3.7%	1.8%	40.4%	3.5%	1.9%	3.2%
0.08 à 0.1	1.9%	2.3%	27.8%	1.8%	1.7%	2.7%
0.1 à 0.12	1.9%	1.4%	10.5%	3.3%	2.5%	3.7%
0.12 à 0.14	1.2%	1.0%	4.7%	2.4%	1.6%	1.6%
0.14 à 0.16	1.3%	1.0%	8.4%	1.7%	1.1%	1.6%
0.16 à 0.18	0.6%	0.6%	6.7%	1.5%	1.4%	2.3%
0.18 à 0.2	1.1%	1.1%	1.7%	2.0%	1.3%	2.1%

TABLE 2.3 – Erreur moyenne engendrée (en %) sur le profil radial des quantités doublement moyennées (Cas 1) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

L_i à L_{i+1} (m)	$\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$	$\langle u'_z u'_r \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$	$\langle u'_r T' \rangle^i$
0.005 à 0.01	93.2%	26.0%	217.6%	12.3%
0.01 à 0.02	45.6%	35.2%	179%	117.4%
0.02 à 0.04	68.0%	41.4%	59.3%	23.4%
0.04 à 0.06	46.1%	18.3%	41.3%	15.6%
0.06 à 0.08	24.1%	20.4%	26.5%	13.2%
0.08 à 0.1	87.4%	12.2%	8.9%	9.7%
0.1 à 0.12	29.5%	12.8%	17.0%	5.9%
0.12 à 0.14	40.7%	6.7%	15.0%	3.6%
0.14 à 0.16	15.7%	5.2%	15.5%	3.6%
0.16 à 0.18	14.9%	6.5%	15.0%	6.0%
0.18 à 0.2	11.9%	3.4%	6.2%	4.3%

TABLE 2.4 – Erreur moyenne engendrée (en %) sur le profil radial des quantités diffusives doublement moyennées (Cas 1) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

L_i à L_{i+1} (m)	ϕ	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle T \rangle^i$	$\langle k_d \rangle^i$	$\langle k \rangle^i$	$\langle \epsilon \rangle^i$
0.005 à 0.01	5.4%	4.2%	5.1%	5.7%	1.2%	1.9%
0.01 à 0.02	3.3%	3.0%	11.5%	3.3%	1.6%	3.6%
0.02 à 0.03	3.3%	2.6%	4.7%	3.5%	1.3%	2.4%
0.03 à 0.04	2.5%	2.2%	4.0%	3.7%	1.7%	3.9%
0.04 à 0.05	2.5%	1.5%	2.1%	1.9%	1.1%	1.6%
0.05 à 0.06	1.4%	0.9%	2.8%	1.8%	0.6%	1.0%
0.06 à 0.07	1.0%	0.7%	1.4%	1.7%	1.2%	2.5%
0.07 à 0.08	1.2%	1.1%	1.4%	3.4%	2.1%	4.9%
0.08 à 0.09	1.1%	0.7%	1.1%	3.2%	1.8%	4.2%
0.09 à 0.1	0.9%	0.7%	0.9%	2.0%	1.3%	3.4%

TABLE 2.5 – Erreur moyenne engendrée (en %) sur le profil radial des quantités doublement moyennées (Cas 2) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

L_i à L_{i+1} (m)	$\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$	$\langle \bar{u}'_z \bar{u}'_r \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$	$\langle \bar{u}'_r \bar{T}' \rangle^i$
0.005 à 0.01	47.9%	65.7%	281.5%	10.9%
0.01 à 0.02	36.5%	47.8%	55.4%	11.4%
0.02 à 0.03	31.8%	35.7%	37.4%	7.4%
0.03 à 0.04	53.4%	24.6%	17.9%	4.2%
0.04 à 0.05	24.8%	15.2%	13.6%	4.2%
0.05 à 0.06	18.6%	64.2%	9.7%	3.7%
0.06 à 0.07	33.9%	8.5%	11.4%	1.9%
0.07 à 0.08	22.7%	15.6%	7.4%	2.4%
0.08 à 0.09	26.1%	8.9%	5.4%	1.7%
0.09 à 0.10	24.9%	8.3%	5.1%	1.5%

TABLE 2.6 – Erreur moyenne engendrée (en %) sur le profil radial des quantités diffusives doublement moyennées (Cas 2) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

L_i à L_{i+1} (m)	ϕ	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle T \rangle^i$	$\langle k_d \rangle^i$	$\langle k \rangle^i$	$\langle \epsilon \rangle^i$
0.005 à 0.01	2.4%	1.7%	3%	3.1%	2.4%	3.2%
0.01 à 0.02	3.1%	2.6%	4.7%	5.7%	2.8%	4%
0.02 à 0.04	2.3%	2.5%	8.1%	5.4%	2.2%	2.8%
0.04 à 0.06	2.1%	1.1%	7%	3.1%	1.2%	2.6%
0.06 à 0.08	1.8%	1.8%	4.1%	2.5%	2.6%	3.7%
0.08 à 0.1	11.3%	1.3%	4.1%	3.1%	2.5%	3.9%
0.1 à 0.12	1.1%	1.2%	2.8%	2.9%	0.1%	3.2%
0.12 à 0.14	0.7%	1.4%	1%	2.7%	1.9%	4%
0.14 à 0.16	0.5%	0.9%	1.6%	2.7%	2.4%	4.6%
0.16 à 0.18	0.7%	0.7%	1.4%	2.5%	2.4%	4.4%
0.18 à 0.2	0.6%	0.6%	1.1%	2.4%	2.2%	4%
0.2 à 0.22	0.5%	0.75%	1%	2.3%	1.5%	3.6%
0.22 à 0.24	0.6%	0.67%	01.2%	2.3%	1.3%	2.7%
0.24 à 0.26	0.7%	0.76%	0.8%	3.2%	1.1%	3.6%
0.26 à 0.28	0.5%	0.64%	1.2%	2.3%	0.65%	2.6%
0.28 à 0.30	0.4%	0.6%	0.6%	1.9%	1%	2.4%
0.30 à 0.32	0.5%	0.47%	0.8%	1.6%	0.9%	2.4%
0.32 à 0.34	0.55%	0.5%	7%	1.5%	0.86%	2.6%
0.34 à 0.36	0.45%	0.8%	1%	1.2%	0.75%	1.7%
0.36 à 0.38	0.3%	0.9%	1.4%	1.9%	0.66%	1.1%
0.38 à 0.4	0.4%	0.7%	0.6%	0.6%	0.68%	0.9%

TABLE 2.7 – Erreur moyenne engendrée (en %) sur le profil radial des quantités doublement moyennées (Cas 3) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

L_i à L_{i+1} (m)	$\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$	$\langle \overline{u'_z u'_r} \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$	$\langle \overline{u'_r T'} \rangle^i$
0.005 à 0.01	37.1%	35.7%	16.9%	10.2%
0.01 à 0.02	35.7%	69%	50.4%	14.3%
0.02 à 0.04	35%	25.5%	45.2%	20%
0.04 à 0.06	11.4%	29.6%	10.4%	12.2%
0.06 à 0.08	15.5%	23.3%	10.7%	11.9%
0.08 à 0.1	37.7%	20.8%	10.6%	9.5%
0.1 à 0.12	24.3%	17%	8.5%	6.8%
0.12 à 0.14	14.9%	14.3%	10.1%	5.9%
0.14 à 0.16	14.4%	10%	15%	6%
0.16 à 0.18	8.7%	6.3%	5%	5%
0.18 à 0.2	6%	5.8%	10%	4%
0.2 à 0.22	9.3%	9.1%	13%	5%
0.22 à 0.24	14.3%	7.9%	9%	7.5%
0.24 à 0.26	7.7%	4.2%	4%	5%
0.26 à 0.28	8.2%	6.2%	11%	2.6%
0.28 à 0.30	7.3%	4%	8.4%	2.3%
0.30 à 0.32	6.1%	3.8%	7.8%	4%
0.32 à 0.34	4.1%	3.6%	6.1%	2.1%
0.34 à 0.36	4.8%	3.8%	6.5%	2.5%
0.36 à 0.38	4.7%	4.7%	6%	1.7%
0.38 à 0.4	5.5%	4.7%	4.6%	2.8%

TABLE 2.8 – Erreur engendrée (en %) sur le profil radial des quantités diffusives doublement moyennées (Cas 3) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} .

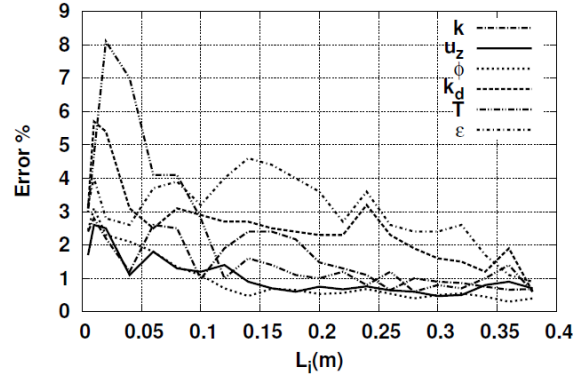


FIGURE 2.7 – Convergence statistique des quantités doublement moyennées (Cas 3) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} (voir table 2.7).

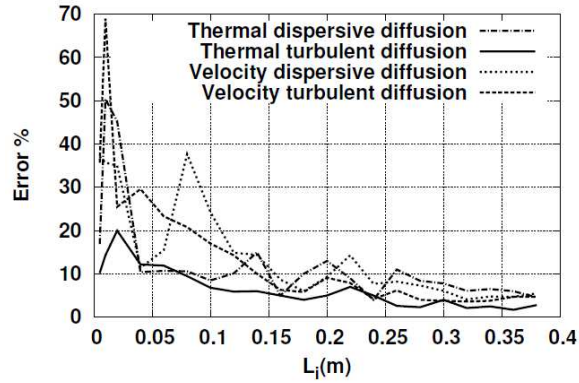


FIGURE 2.8 – Convergence statistique des moments d'ordre deux doublement moyennés (Cas 3) lorsque la longueur du VER est modifiée de L_i à L_{i+1} (voir Table 2.8).

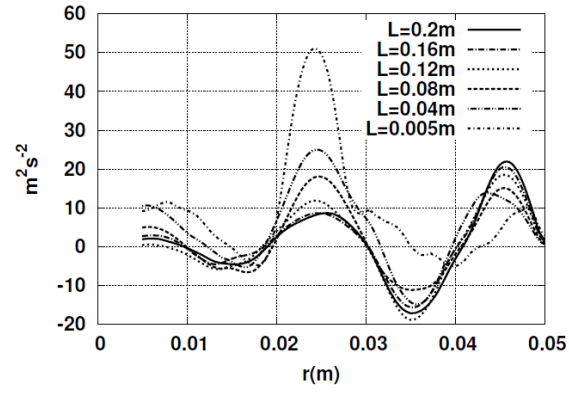


FIGURE 2.9 – Profil radial de la diffusion dispersive de la vitesse $-\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$ pour différentes longueurs L du VER (Cas 1).

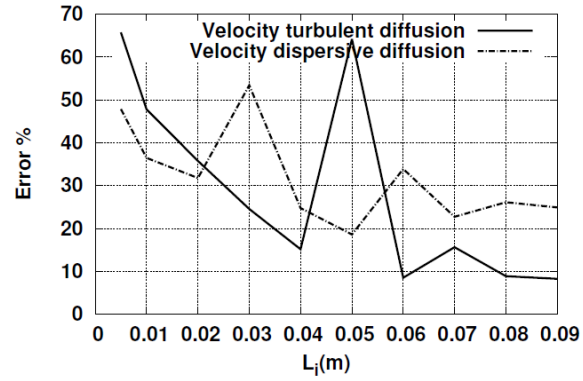


FIGURE 2.10 – Convergence lente des moments d'ordre deux due à la présence de défauts (Cas 2), (voir Table 2.6).

2.6 Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre que le concept de volume élémentaire représentatif est fondamental pour transporter l'information depuis l'échelle microscopique à l'échelle d'observation de façon univoque. Un empilement aléatoire de particules dans un tube n'est pas homogène. Bien que l'on puisse supposer que l'homogénéité est conservée dans les directions axiale et azimutale, notamment par le choix de la forme du VER (forme tubulaire avec une longueur L assez grande pour atteindre la convergence statistique dans la direction axiale), on ne peut assumer l'homogénéité dans la direction radiale. En effet, comme nous le verrons dans les chapitres suivants, les transferts radiaux sont fortement affectés par l'inhomogénéité radiale. Nous avons donc montré que l'épaisseur d du VER doit aussi respecter certaines contraintes pour capturer l'influence de l'inhomogénéité radiale sur les différentes quantités moyennées de façon univoque et ainsi assurer la représentativité du milieu dans la direction radiale.

Chapitre 3

Transfert thermique à la Paroi : le nombre de Nusselt

Sommaire

3.1	Introduction	81
3.2	Étude bibliographique	82
3.2.1	Modèles 1D et 2D	82
3.2.2	Corrélations	84
3.3	Étude physique du nombre de Nusselt	87
3.3.1	Objectif	87
3.3.2	Nombre de Nusselt non local	87
3.4	Conclusion	123

3.1 Introduction

La plupart des modèles existants (que ce soit les modèles 1D ou 2D) pour caractériser les transferts thermiques à l'intérieur des réacteurs tubulaires reposent sur un modèle à deux coefficients $\lambda_r - h_w$ avec λ_r la conductivité thermique effective du lit catalytique et h_w le coefficient de transfert à la paroi. L'établissement de ces modèles est fondé sur une hypothèse qui simplifie grandement la complexité des mécanismes physiques pilotant le transfert thermique. En effet, en utilisant une conductivité thermique constante λ_r pour capturer le transfert thermique radial, on assume d'office que le milieu est homogène et que les mécanismes physiques pilotant ce transfert

sont les mêmes partout dans la direction radiale. Cette hypothèse permet de récupérer une température moyenne $T(z)$ à chaque position z le long du tube dans le cas 1D (eq. (3.3)) et un profil de température $T(r, z)$ dans le cas 2D (voir l'équation (3.9)). Or la température mesurée à la paroi $T_w(z)$ est différente de la température obtenue par ces types de modèles.

$$T_w(z) \neq T(z) \quad (1D) \quad (3.1)$$

$$T_w(z) \neq T(r = R, z) \quad (2D) \quad (3.2)$$

Le saut de température à la paroi est alors évalué par un coefficient de transfert à la paroi h_w . Le problème qui se pose alors est de savoir comment déterminer ce jeu de coefficients non indépendants dans les réacteurs tubulaires. La forte variation de la porosité dans la direction radiale désavoue l'hypothèse d'homogénéité selon cette direction (figure 2.4). Ce faisant, le transfert radial ne peut être décrit en toute rigueur par une conductivité effective constante. De ce fait, λ_r devient un paramètre à déterminer pour lequel il existe une plage de valeurs possibles. Comme h_w est lié à λ_r , le coefficient de transfert à la paroi devient aussi un paramètre dépendant du premier. Bien que de nombreuses corrélations empiriques existent dans la littérature pour estimer ces deux paramètres, une entente harmonieuse entre elles n'est pas encore tout à fait acquise. Ceci est d'ailleurs très clairement mis en évidence dans la littérature [20, 53].

Nous allons dans ce chapitre tenter de comprendre les mécanismes physiques influant le transfert à la paroi à partir des équations fondamentales gouvernant le transport de la chaleur. Ce faisant, on proposera une approche alternative de dériver des corrélations pour h_w en s'appuyant sur des bases plus théoriques. Cela permettra de faire le tri parmi les corrélations existantes et de réduire les incertitudes autour de ces coefficients pourtant très utilisés dans la pratique.

3.2 Étude bibliographique

3.2.1 Modèles 1D et 2D

Le modèle 1D est le modèle le plus simple que l'on puisse trouver pour décrire les transferts thermiques dans les réacteurs tubulaires. D'importantes simplifications sont faites pour construire ce modèle. En effet, le lit catalytique est supposé homogène de porosité moyenne ϕ_0 . Et la vitesse du

fluide traversant le milieu, obtenue par la relation de Darcy-Forchheimer [6] (eqs.(4) et (5)), est aussi considérée constante. L'équation grandement simplifiée s'écrit [54],

$$-U_s \rho C_p \frac{dT}{dz} + \frac{U}{d_t} (T_w - T) = 0 \quad (3.3)$$

avec ρ la densité du fluide, C_p la capacité calorifique massique du fluide, U_s la vitesse superficielle, d_t le diamètre du tube et U le coefficient de transfert thermique total dans la direction radiale.

Le modèle 2D de l'équation du transport de la chaleur s'écrit quant à lui [54],

$$\rho C_p U_s \frac{\partial T}{\partial z} = \lambda_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (3.4)$$

$$-\lambda_r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = h_w (T(r=R) - T_w) \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (3.6)$$

$$T \Big|_{z=0} = T_0(r) \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L} = 0 \quad (3.8)$$

avec λ_r la conductivité effective du lit catalytique et h_w le coefficient de transfert à la paroi. L'hypothèse d'homogénéité radiale du lit catalytique est toujours conservée en gardant U_s et λ_r constants. La solution analytique de (3.4)-(3.8) est connue et est de la forme,

$$T(r, z) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(A_n r) \exp(-\alpha A_n^2 z)}{A_n J_1(A_n) [(A_n/Bi)^2 + 1]} \quad (3.9)$$

où J_i est la fonction de Bessel d'ordre i et A_n les racines de

$$A_n J_1(A_n) = Bi \cdot J_0(A_n) \quad (3.10)$$

avec Bi le nombre de Biot défini par

$$Bi = \frac{h_w R}{\lambda_r} \quad (3.11)$$

Enfin le coefficient α vaut

$$\alpha = \frac{(\rho C_p)_f L d_p^2 R^2 U_s}{\lambda_r} \quad (3.12)$$

avec L la longueur du lit catalytique et R le rayon du tube. Le coefficient de transfert thermique total U du modèle 1D est relié aux paramètres du modèle 2D par l'expression [55].

$$\frac{1}{U} = \frac{1}{h_w} + \frac{d_t}{8\lambda_r} \quad (3.13)$$

Des corrélations empiriques sont ensuite trouvées pour ces deux inconnus.

3.2.2 Corrélations

La plupart des corrélations évaluant λ_r et h_w sont obtenues de façon empirique. On peut par exemple, pour trouver l'inconnu λ_r , résoudre l'équation (3.4) en reconstruisant les dérivées de la température à partir de profils obtenus expérimentalement. h_w est ensuite évalué par l'équation (3.10), sachant que $\log(T)$ est linéaire selon z et que la pente vaut $-\alpha A_1^2$ [56]. Une autre méthode consiste à déterminer la racine A_1 de l'équation (3.10) à partir du profil radial de la température mesurée en sortie,

$$\frac{T_m(z=1)}{T(r=0, z=1)} = \frac{2J_1(A_1)}{A_1} \quad (3.14)$$

En utilisant la pente de $\log(T)$ dans la direction axiale et A_1 on a accès à α et donc à λ_r . Le nombre de Biot est ensuite déterminé par (3.10) permettant de remonter à h_w [57]. On peut aussi trouver les coefficients λ_r et h_w optimaux qui permettent de superposer le profil obtenu par l'équation (3.9) sur les mesures expérimentales [58].

Il est à noter [59] cependant que le profil de température obtenu par la méthode des moindres carrés dépend du nombre de mesures de température que l'on dispose dans la direction radiale. En augmentant le nombre de mesures dans la région proche paroi où la température varie fortement, le profil de température obtenu par (3.9) s'éloigne sensiblement de tous les points de mesure, l'erreur surgissant de la région proche paroi étant propagée le long de la direction radiale. Cependant, en ne gardant que les mesures loin de la paroi, on obtient un profil de température qui a au moins le mérite de

bien prédire la température de la région intérieure. Il est ainsi clair que les mécanismes pilotant les transferts thermiques dans la région proche paroi sont différents de ceux qui régissent le transfert loin des parois. Il semble de plus que la variabilité des paramètres λ_r et h_w peut aussi être assujettie aux conditions de mesure et au choix humain. Il est aussi important de noter que la variabilité du coefficient de transfert à la paroi est plus importante que celle de la conductivité effective du lit catalytique. En effet, à chaque fois que l'on ajoute ou que l'on enlève un point de mesure, le profil de température est modifié conformément à la méthode des moindres carrés. N'ayant aucun point de mesure sur la température du fluide côtoyant la paroi $T(r = R)$, la température extrapolée à cet endroit dépend de la courbure du profil de température infléchi par le point de mesure le plus proche de la paroi. Cette courbure variant fortement dans cette région à chaque ajout ou retrait de points de mesure, la température extrapolée sur la paroi varie aussi de façon importante. Le coefficient de transfert à la paroi qui par définition mesure le saut de température $[T(r = R) - T_w]$ en est directement impacté et c'est cette dépendance liée à la variabilité du choix humain qui semble se refléter sur certaines corrélations publiées dans la littérature.

La corrélation couramment utilisée pour estimer la conductivité thermique du lit catalytique est de la forme [60],

$$\frac{\lambda_r}{\lambda_f} = \frac{\lambda_r^0}{\lambda_f} + \kappa \cdot Pr \cdot Re_p \quad (3.15)$$

avec λ_f la conductivité thermique du fluide, Pr le nombre de Prandtl moléculaire, Re_p le nombre de Reynolds basé sur le diamètre de la particule et κ une constante à déterminer expérimentalement. Dans cette formulation, on distingue aisément la partie stagnante de la partie convective. La partie stagnante λ_r^0 comprend la conduction du fluide et du solide ainsi que les transferts radiatifs. Notons que dans les conditions opératoires c'est le transfert radiatif qui contribue le plus à la partie stagnante de la conductivité effective. La conductivité thermique du milieu lorsque le fluide est au repos a une forme relativement complexe [61],

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_r^0}{\lambda_g} = & \left[\frac{(1 - \frac{\lambda_f}{\lambda_p} B)}{(1 - \frac{\lambda_f}{\lambda_p} B)^2} \ln\left(\frac{\lambda_p}{B \lambda_f}\right) - \frac{B+1}{2} - \frac{B-1}{1 - \frac{\lambda_f}{\lambda_p} B} \right] \times \frac{2\sqrt{1-\phi}}{1 - \frac{\lambda_f}{\lambda_p} B} \\ & + \sqrt{1-\phi} \left(\frac{\lambda_f}{\lambda_R} + \frac{\lambda_f}{\lambda_p} \right)^{-1} + (1 - \sqrt{1-\phi}) \left(1 + \frac{\lambda_R}{\lambda_f} \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Auteurs	Re	N	κ
A.G. Dixon [62]	$100 \leq Re \leq 3200$	$1.14 \leq N \leq 6.4$	$\frac{1}{10(1+[19.4/N^2])}$
Demirel and al.[63]	$200 \leq Re \leq 1200$	$4.5 \leq N \leq 7.5$	$\frac{0.048}{Pr} (air)$
Yagi and al. [64]	$50 \leq Re \leq 400$	$4.8 \leq N \leq 8.8$	0.12

TABLE 3.1 – Quelques exemples de valeurs pour κ disponible dans la littérature lorsque la forme des particules est sphérique.

avec

$$B = 1.25 \left(\frac{1 - \phi}{\phi} \right)^{10/9} \quad (3.17)$$

et

$$\frac{\lambda_R}{\lambda_f} = 2.27 \times 10^{-7} \left(\frac{e}{2 - e} \right) T^3 \frac{d_p}{\lambda_f} \quad (3.18)$$

où e est l'émissivité, T la température, d_p le diamètre équivalent, λ_R la conductivité radiative, λ_f la conductivité du fluide, λ_p la conductivité de la particule et ϕ la porosité.

La plupart des estimations de κ disponible dans la littérature sont empiriques et sont obtenues à bas Reynolds (voir Table 3.1). On peut observer qu'il existe une plage de valeur possible de κ pour un lit catalytique composé de particules sphériques.

De même, une corrélation de type [65],

$$\frac{d_p h_w}{\lambda_f} = \frac{h_w^0 d_p}{\lambda_f} + \beta \cdot Pr t^\gamma \cdot Re_p^\delta \quad (3.19)$$

permet d'évaluer le transfert à la paroi, avec h_w^0 le transfert à la paroi lorsque le fluide est au repos. Une corrélation possible pour la partie stagnante h_w^0 peut s'écrire sous la forme [66],

$$\frac{h_w^0 d_p}{\lambda_f} = \left(1.3 + \frac{5}{N} \right) \frac{\lambda_r^0}{\lambda_f} \quad (3.20)$$

La table 3.2 présente une sélection de corrélations différentes décrivant la partie convective du coefficient de transfert à la paroi pour des lits catalytiques composés de particules sphériques. Il est à rappeler que le caractère dispersif de ces corrélations les rend peu fiables pour une utilisation pratique.

Author	N	Re_p	Correlation
Li and Finlayson [53]	$3 \leq N \leq 20$	$20 \leq Re_p \leq 7600$	$0.17 Re_p^{0.79}$
Demirel and al. [63]	$4.5 \leq N \leq 7.5$	$200 \leq Re_p \leq 1450$	$0.217 Re_p^{0.756}$
Dixon and al. [67]	$3 \leq N \leq 12$	$50 \leq Re_p \leq 500$	$(1 - 1.5N^{-1.5}) Pr^{1/3} Re_p^{0.59}$
Dixon [62]	$1.13 \leq N \leq 6.4$	$300 \leq Re_p \leq 3000$	$0.523(1 - N^{-1}) Pr^{1/3} Re_p^{0.738}$
Peters and al. [68]	$2.7 \leq N \leq 11$	$200 \leq Re_p \leq 6000$	$4.9N^{-0.26} Pr^{0.33} Re_p^{0.45}$

TABLE 3.2 – Corrélations empiriques estimant la partie convective du transfert à la paroi.

3.3 Étude physique du nombre de Nusselt

3.3.1 Objectif

Le but ici est de dériver une expression exacte du coefficient de transfert à la paroi à partir de l'équation fondamentale gouvernant le transport de la chaleur. En effet, nous avons vu dans la section précédente qu'il existe de nombreuses corrélations pour évaluer les deux coefficients paramétrant les modèles 1D et 2D à savoir λ_r et h_w , mais aussi qu'il existe une certaine discordance entre elles, ce qui les rend peu fiables pour une évaluation précise de ces paramètres. De plus, il a été observé que la dispersion est plus marquée sur le coefficient de transfert à la paroi que sur celui décrivant le transfert dans le lit catalytique. L'expression exacte permet d'une part de lever une partie des incertitudes entourant ce coefficient et donc d'avoir des corrélations plus fiables et d'autre part d'identifier les mécanismes physiques pilotant le transfert à la paroi.

3.3.2 Nombre de Nusselt non local

Exact non local expression for the wall heat transfer coefficient in tubular catalytic reactors

I. Thiagalingam^{a,*}, M. Dallet^a, I. Bennaceur^b, S. Cadalen^c, P. Sagaut^d

^a*Institut Jean-Le-Rond d'Alembert, Université Pierre et Marie Curie - Paris 6, UMR 7190,
4 place Jussieu, case 162, F-75252 Paris Cedex 05, France*

^b*ONERA, BP72 - 29 avenue de la Division Leclerc, FR-92322 Chatillon Cedex, France*

^c*Paris-Saclay Research Center-Air Liquide, 1 Chemin de la porte des Loges, Les loges en
Josas, BP 126, 78 354 Jouy-en-Josas, France*

^d*Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, M2P2 UMR 7340, 13451 Marseille,
France*

Abstract

A new exact and non local expression for the wall Nusselt number is derived to have a deep insight into the physical mechanisms that govern the wall heat transfer. 3D high-fidelity numerical simulations (RANS) are then carried out in tubular packed beds and a new set of criteria is defined to extend the Representative Elementary Volume concept to packed bed configurations which enables to unequivocally up-scale 3D simulation data to the observation scale. The mean flow deviation and the mechanical dispersion are shown to play a key role in the wall heat transfer. Finally, the usual correlations of the form $Nu = \alpha Re_p^\beta$ found in the literature for the Nusselt number are validated through fine 3D simulations and on the basis of physical investigations for $4000 \leq Re_p \leq 30000$.

Keywords: Packed beds, 3D Numerical Simulation, Heat transfer, Nusselt number, Representative Elementary Volume, Turbulence, Dispersion, Up-scaling.

2010 MSC: 00-01, 99-00

*Corresponding author

Email address: ilango.thiagalingam@gmail.com (I. Thiagalingam)

1. Introduction

Randomly packed tubular catalytic reactors are widely used in chemical engineering processes such as steam methane reforming in hydrogen production. The accurate estimation of the radial temperature profile, particularly for low tube-to-particle diameter ratio reactors, is a key element in the reactor design and performance studies as it directly drives catalytic reaction rates. Moreover, the accurate evaluation of the tube temperature is also a very useful and valuable information to estimate the life time of the tubular reactor. The radial heat transfer modeling issue has been investigated for more than 50 years but it is still difficult to find a reliable and widely accepted heat transfer correlation in the literature [1]. Typical radial temperature profiles observed in experimental and numerical studies [2] exhibit a smooth decrease in the bulk of the bed but a steep slope in the near wall region. Those two-region profiles are in most cases bridged by a 'hump' profile. These features highlight that more than one physical mechanism drive the heat transfer from the wall to the bed center and that those mechanisms depend on the radial position. Deep insights into the turbulent and dispersive flow field features are required to understand how it affects the local convective heat transfer.

Most of the models in use are deterministic and pseudo-homogeneous. The classical one is the two coefficients model $\lambda_r - h_w$, for which the whole radial heat transfer is lumped into the constant bulk thermal effective conductivity λ_r and the apparent wall heat transfer coefficient h_w [3].

$$\rho C_p U_s \frac{\partial T}{\partial z} = \lambda_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) \quad (1)$$

$$-\lambda_r \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=R} = h_w [T(r=R) - T_w] \quad (2)$$

$$\frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \quad (3)$$

$$T \Big|_{z=0} = T_0(r) \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=L_t} = 0 \quad (5)$$

where U_s is the bulk superficial velocity derived from Ergun correlation [4]. It is worth noting that assuming constant bulk velocity and constant effective thermal conductivity, the radial homogeneity hypothesis is fully used. This simplification enables to obtain analytical solutions for Eqs.(1)-(5) which read,

$$T(r, z) = 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(A_n r) \exp(-\alpha A_n^2 z)}{A_n J_1(A_n) [(A_n/Bi)^2 + 1]} \quad (6)$$

where J_i is i^{th} order Bessel function and A_n are roots of

$$A_n J_1(A_n) = Bi \cdot J_0(A_n) \quad (7)$$

with Bi the Biot number defined as

$$Bi = \frac{h_w R}{\lambda_r} \quad (8)$$

The parameter α reads

$$\alpha = \frac{\rho C_p L_t d_p^2 R^2 U_s}{\lambda_r} \quad (9)$$

where L_t is the bed length and R the tube radius.

20 One of the methods frequently used to determine λ_r and h_w consists in fitting the temperature profile (6) on experimental data. Hence, the two parameters are estimated by least square method (see [5] and [6]). On the other hand, Beek [7] and Li and al.[6] brought to light important disagreements existing between literature correlations for λ_r and h_w . It was shown that the scatter is even
25 much wider as far as the wall heat transfer coefficient is concerned. One of the explanations to the disagreement was pulled up in [8]. It was pointed out that when fitting measurement points by least square methods, the resulting profile depends on the number of sampling points. In other words, removing or adding a measurement point has an impact on the temperature profile. Moreover, it
30 was shown that using only measurement points of the bulk region enables the curve obtained from (6) to at least well fit the bed core temperature.

Hence, one can deduce that the nearest measurement point to the wall gives the slope to determine the extrapolated fluid temperature at the wall $T(r = R)$. As the temperature profile displays a stiff slope in the near wall region, huge scatter can be expected on the speculated value of $T(r = R)$ and so on h_w . Obviously, the uncertainties stem from the near wall region extra thermal resistance, which is arbitrarily split between the constant λ_r and h_w . Moreover, as tube to particle diameter ratio decreases, the wall effects are extended from the near wall zone to a significant distance into the bed and the main part of the convective thermal resistance generated by the flow maldistribution is attributed to h_w as the constant bulk effective conductivity λ_r is no more valid for low tube/particle diameters ratios.

Recently, numerous CFD simulations have confirmed the radial variation of the void and velocity profiles [9, 10, 11, 12] underlying that λ_r is a function of the radial position. Therefore, the extra resistance in the near wall region should then be taken into account by a local effective thermal conductivity $\lambda_r(r)$. Hence, the apparent wall heat transfer coefficient can be removed from the model as it has no physically supported existence. But to date, such a radial varying thermal conductivity is barely at its early stage of development [13, 14] and models using the wall heat transfer coefficient are still widely used [15, 16, 17].

This paper's aim is to investigate the physical mechanisms contributing to the wall heat transfer in low tube to diameter ratio tubular reactors. To this end, three-dimensional high-fidelity CFD simulations are carried out in wall bounded tubular packed beds of different particle shapes (spheres and perforated cylinders). The porous medium formalism and the Representative Elementary Volume concept are extended to wall bounded anisotropic packed beds in order to get meaningful averaged flow and temperature field. A new non local expression of the wall heat transfer is then derived using the integration method introduced by Fukagata and al.[18] for the skin friction and extended to the wall heat transfer by Kasagi and al.[19]. Previously, the method had been successfully extended to investigate skin friction on geometrically complex

surfaces by [20, 21], and for compressible flow configurations by [22]. The advantage of the non local expression is its ability to highlight all the weighted
65 physical contributions responsible for the observed wall heat transfer. Hence, one is advised on which mechanisms it is worth to work on to improve the wall heat transfer.

The paper is organized as follows. The new non local expression for the macroscopic Nusselt number is first presented in Section 2. The microscopic
70 simulations used to compute the different contributions that appear at the macroscopic level are discussed in Section 3. Both the theoretical definition and the practical identification of the elementary volume used to derive the macroscopic description of the medium are then discussed in Section 4. The macroscopic Nusselt number is finally illustrated on two physical configurations
75 and a physical investigation is carried out in Section 5. Modelling of the Nusselt number via empirical correlations for the present random porous medium configuration is then discussed in Section 6.

2. A new non local expression for the wall heat transfer coefficient

The volume averaging concept is first recalled. It is then applied to the
80 Reynolds averaged equation which describes the energy conservation at the pore scale in order to obtain the governing equation of the energy at the macroscopic scale. Finally, the non local expression for the Nusselt number is derived by applying the integration operator to the macroscopic energy conservation equation [23].

85 2.1. Double decomposition concept

One can split an instantaneous quantity into two parts: a mean quantity and its fluctuation [24]. Hence the time decomposition reads,

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi', \quad (10)$$

where $\bar{\varphi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \varphi dt$ is the time averaged quantity and φ' its fluctuation around the mean quantity. The spatial decomposition is applied following the

same reasoning,

$$\varphi = \langle \varphi \rangle^i + \delta \varphi, \quad (11)$$

with $\langle \varphi \rangle^i$ the intrinsic average of φ in the fluid phase $\langle \varphi \rangle^i = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \varphi dV$ and $\delta \varphi$ the spatial deviation. The porosity, $\phi = \frac{V_f}{V}$, links the intrinsic averaged quantity to the volume averaged one,

$$\langle \varphi \rangle^v = \phi \langle \varphi \rangle^i, \quad (12)$$

where V is the volume in which the average is carried out and V_f the volume of fluid inside it. It is worth noting that the scale separation between averaged and instantaneous quantities requires the average of the first order moments to damp to zero, $\langle \delta \varphi \rangle^i = \bar{\varphi}' = 0$. Applying the double decomposition to an instantaneous quantity φ , one gets

$$\varphi = \langle \bar{\varphi} \rangle + \langle \varphi' \rangle + \delta \bar{\varphi} + \delta \varphi' \quad (13)$$

Applying both time and volume averaging operators, which are commutative for rigid medium ($\langle \bar{\varphi} \rangle = \overline{\langle \varphi \rangle}$), to (13) one can notice that the three last terms on the right hand side vanish, as required by the scale separation.

One reminds here two permutation rules between averaging and derivative operators which are very useful in practical applications [25].

$$\langle \nabla \varphi \rangle^v = \nabla \langle \varphi \rangle^v + \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n} \varphi dA, \quad (14)$$

$$\langle \nabla \cdot \varphi \rangle^v = \nabla \cdot \langle \varphi \rangle^v + \frac{1}{V} \int_{A_i} \mathbf{n} \cdot \varphi dA \quad (15)$$

with dA a surface element, $\mathbf{n}$ the normal vector oriented from the solid to fluid
90 phase and A_i the solid surface in the volume V .

2.2. Non local expression for the wall heat transfer coefficient

In the following, superscript * stands for quantities with dimensions whereas those without superscript are dimensionless ones. In order to derive the macroscopic governing equation describing turbulent heat transfer in packed beds,

95 volume averaging operator is applied to the steady Reynolds averaged governing equation of the fluid temperature written in cylindrical coordinates. Thus one gets,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z^*} \langle \bar{I}_z^* \rangle + (\rho^* C_p^*)_f \frac{1}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} r^* \phi [\langle \bar{u}_r^* \rangle^i \langle \bar{T}^* \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r^* \delta \bar{T}^* \rangle^i + \langle \bar{u}_r^{*'} \bar{T}^{*'} \rangle^i] \\ - \frac{\lambda_f^*}{r^*} \frac{\partial}{\partial r^*} r^* [\phi \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T}^* \rangle^i + \frac{1}{V^*} \int_{A_i^*} n_r \delta \bar{T}^* dA^*] = 0 \end{aligned} \quad (16)$$

where the axial inhomogeneous term reads

$$\begin{aligned} \langle \bar{I}_z^* \rangle = (\rho^* C_p^*)_f \phi [\langle \bar{u}_z^* \rangle^i \langle \bar{T}^* \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z^* \delta \bar{T}^* \rangle^i + \langle \bar{u}_z^{*'} \bar{T}^{*'} \rangle^i] \\ - \lambda_f^* [\phi \frac{\partial}{\partial z^*} \langle \bar{T}^* \rangle^i + \frac{1}{V^*} \int_{A_i^*} n_z \delta \bar{T}^* dA^*] \end{aligned} \quad (17)$$

From the global heat balance, the supplied heat at the wall is removed by convection at the steady state. The removed amount of heat is constant and proportional to the bulk temperature variation ΔT_z^* in the streamwise direction. Thus, the wall temperature changes linearly along the tube. Using the average wall temperature $\langle \bar{T}_w \rangle^*$ and ΔT_z^* , the dimensionless temperature reads,

$$\langle \bar{\theta} \rangle^i = \frac{\langle \bar{T}_w \rangle^* - \langle \bar{T} \rangle^{i*}}{\Delta T_z^*} \quad (18)$$

The bulk temperature is then defined as

$$\langle \bar{\theta}_b \rangle^i = \frac{\langle \bar{T}_w \rangle^* - \langle \bar{T}_b \rangle^{i*}}{\Delta T_z^*} \quad (19)$$

where

$$\langle \bar{T}_b \rangle^{i*} = \frac{\int_0^{R^*} r^* \langle \bar{I}_z^* \rangle dr^*}{(\rho C_p)_f^* \int_0^{R^*} r^* \phi \langle \bar{u}_z^* \rangle dr^*} \quad (20)$$

Using the tube radius R^* , the tube length L^* and twice the bulk velocity $2U_b^*$ to get dimensionless distances and velocities, equation (16) becomes,

$$\begin{aligned} \sigma [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i + \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{I}_z \rangle] - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \phi [\langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i + \langle \bar{u}_r' \bar{\theta}' \rangle^i] \\ + \frac{1}{Re \cdot Pr} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r [\phi \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{\theta} \rangle^i + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_r \delta \bar{\theta} dA] = 0 \end{aligned} \quad (21)$$

with

$$\langle \bar{I}_z \rangle = -\phi \left[\langle \bar{u}_z \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{\theta} \rangle^i + \langle \bar{u}'_z \bar{\theta}' \rangle^i \right] + \frac{\sigma}{Re \cdot Pr} \left[\phi \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{\theta} \rangle^i + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_z \delta \bar{\theta} dA \right] \quad (22)$$

where

$$\sigma = \frac{R^*}{L^*} \quad (23)$$

$$Re = \frac{d_t^* U_b^*}{\nu^*} \quad (24)$$

$$U_b^* = \frac{2}{R^{*2}} \int_0^{R^*} r^* \phi \langle \bar{u}_z^* \rangle^i dr^* \quad (25)$$

and Pr the molecular Prandtl number. Here, the Nusselt number is defined as

$$Nu = -\frac{2[\langle \frac{\partial}{\partial r} \bar{\theta} \rangle |_{r=1}]}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \quad (26)$$

Applying the integration operator $\int_0^1 dr \int_r^1 r dr$ to (21),

$$\begin{aligned} & \int_0^1 dr \int_r^1 r dr \left\{ \frac{-1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \phi \left[\langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i + \langle \bar{u}'_r \bar{\theta}' \rangle^i \right] \right. \\ & \left. + \frac{1}{Re \cdot Pr} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[\phi \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{\theta} \rangle^i + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_r \delta \bar{\theta} dA \right] + \sigma [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i + \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{I}_z \rangle] \right\} = 0 \end{aligned} \quad (27)$$

the non local identity for the wall heat transfer coefficient reads,

$$\begin{aligned} Nu &= \frac{2}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \left(-\int_0^1 r \phi \left[\frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{\theta} \rangle^i + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_r \delta \bar{\theta} dA \right] dr \right. \\ & \left. + Re \cdot Pr \int_0^1 r \left[\phi \langle \bar{u}'_r \bar{\theta}' \rangle^i + \phi \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i + \phi \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i + \sigma [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i + \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{I}_z \rangle] r \right] dr \right) \end{aligned} \quad (28)$$

Considering a homogeneous packed bed in the axial direction and linking top and bottom boundaries periodically (imposing for instance a constant mass

flow rate on these boundaries), it can be deduced that $\frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{I}_z \rangle = 0$. Thus,

$$Nu = \frac{2}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \left(\int_0^1 r \phi \underbrace{\left[\frac{-\partial}{\partial r} \langle \bar{\theta} \rangle^i - \frac{1}{V} \int_{A_i} n_r \delta \bar{\theta} dA \right]}_I dr \right. \\ \left. + Re \cdot Pr \int_0^1 r \left[\underbrace{\phi \langle \overline{u'_r \theta'} \rangle^i}_{II} + \underbrace{\phi \langle \delta \overline{u_r} \delta \bar{\theta} \rangle^i}_{III} + \underbrace{\phi \langle \overline{u_r} \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i}_{IV} + \underbrace{\phi \sigma \langle \overline{u_z} \rangle^i r}_V \right] dr \right) \quad (29)$$

This new non local expression points out five physical mechanisms responsible for the radial heat transfer:

- 100 • conduction (I), which originates in radial variations of the mean macroscopic temperature profile, $\langle \bar{\theta} \rangle^i$, and the fluctuations of the RANS mean temperature field inside the REV, $\delta \bar{\theta}$.
- turbulent mixing (II), which is due to the turbulent heat flux observed at the microscopic level in the RANS mean temperature budget equation. In practice this term can be computed using time-averaged Direct Numerical Simulation results or RANS models.
- 105 • dispersive mixing (III), which is due to the spatial fluctuations of RANS results (mean temperature and velocity fields) inside the REV. This term is computed performing REV-averaging over microscopic simulation results.
- 110 • radial convection (IV), which represents the heat transport by the radial macroscopic velocity, $\langle \overline{u_r} \rangle^i$.
- mean velocity deviation (V), which accounts for the contribution due to the influence of the mean fluid dynamic disturbed by the inhomogeneity of the packing in the radial direction. Indeed, if the medium is homogeneous in the radial direction, one is able to deduce $\phi \langle \overline{u_z} \rangle^i = U_0$ at any position r where U_0 is a constant Darcy velocity in an isotropic and homogeneous medium. Therefore, $\frac{2}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} (Re \cdot Pr \cdot \sigma \int_0^1 r^2 \phi \langle \overline{u_z} \rangle^i dr) = \frac{2\sigma Re \cdot Pr U_0}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \frac{U_0}{3}$. Applying the operator $\frac{2}{\langle \bar{\theta}_0 \rangle^i} \int_0^1 r dr$ to (21), with $\langle \bar{\theta}_0 \rangle^i = \frac{\langle \bar{T}_w \rangle^* - \langle \bar{T} \rangle^{i*}(r=0)}{\Delta T_z^*}$, one
- 115

gets $Nu = \frac{\sigma Re \cdot Pr}{2\langle\bar{\theta}_0\rangle^i}$. Therefore, $\frac{2\sigma Re \cdot Pr}{\langle\bar{\theta}_b\rangle^i} \frac{U_0}{3} = \frac{4}{3} \frac{\langle\bar{\theta}_0\rangle^i}{\langle\bar{\theta}_b\rangle^i} U_0 \cdot Nu$. Thus, it seems
120 obvious that if the medium was homogeneous in the radial direction, the mean velocity deviation contribution term would vanish, becoming rather a multiplying factor for all contributions listed above.

3. 3D numerical simulation of turbulent flow and temperature field in wall bounded packed beds

Two packing configurations are considered here to assess the influence of
125 particles shape on the wall heat transfer coefficient. Defining N as the ratio between the tube diameter d_t^* and the equivalent particle diameter d_p^* , we consider packings with $N = 5$ for which the radial anisotropy induced by the wall is important enough to escape the validity range of the usual two coefficients
130 model $\lambda_r - h_w$. The shape influence is evaluated considering spherical particles and perforated cylinders (Table 1). Packings are generated with the commercial algorithm *DigiPacTM*. It works by digitalising particles, the container and the blank space. Hence, the required memory resources and simulation time are significantly reduced compared to other algorithms working with the mathematically described geometry [26, 27, 28, 29]. A collision guided packing algorithm
135 is first set. Particles are thrown from the top and at each time step, they move of one voxel in a direction defined by the nominal forces and torques if any overlaps are found. The packing is considered to be converged when no more particles can be added. The algorithm is then switched to Random Placement
140 Packing to fill blanks in the top and the bottom sides. Finally, as the top and bottom boundaries are linked as periodic, particles are all lifted for a few time steps to obtain a periodic packing (Figures 1 and 2). Packed beds are considered to be homogeneous in the axial and azimuthal directions but presenting radial void variation.

During the mesh-building step for CFD simulations, particle-particle and
145 particle-tube contact points but also very narrow gaps between particles or particles and wall generate highly skewed cells leading to convergence problems

Case	Particle Shape	N	Number of cells in fine CFD grid
1	Spherical	5	51 millions
2	cylindrical with holes	5	42.5 millions

Table 1: Main characteristics of Packing beds.

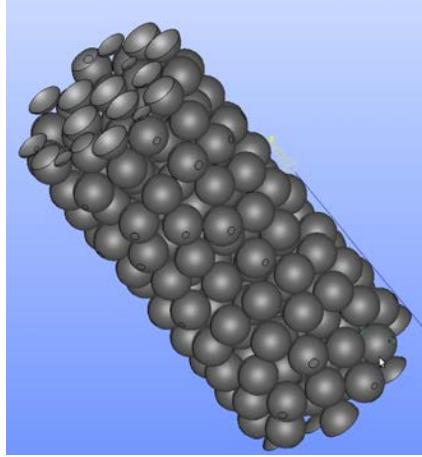


Figure 1: Periodic packing with spherical particles (case 1).



Figure 2: Periodic packing with perforated cylinders (case 2).

in CFD simulations. To prevent this, one can reduce or increase globally the size of particles by for instance 1%. But it was advocated in [30] that the global
 150 modification leads to errors on the porosity and the pressure drop of around 4% and 12 – 15% respectively. Hence, the geometry is locally modified creating a wider gap between particles attached with contact points or narrow gaps. This is achieved by detecting particles which are close to one to another with a distance smaller than 1% of d_p^* , increasing its radius by 2% of d_p^* , removing
 155 the overlapping parts on other particles then decreasing the particle size to its original one (Figure 3). Thus, the minimal gap between particles is guaranteed to be greater than 1% of d_p^* . The tube wall radius is then decreased by 2% of d_p^* and parts of particles laying outside of the new cylinder are removed. The tube gets then back to its original dimensions. Hence, a small gap between the tube
 160 and surrounding particles is created to make the mesh building step easier.

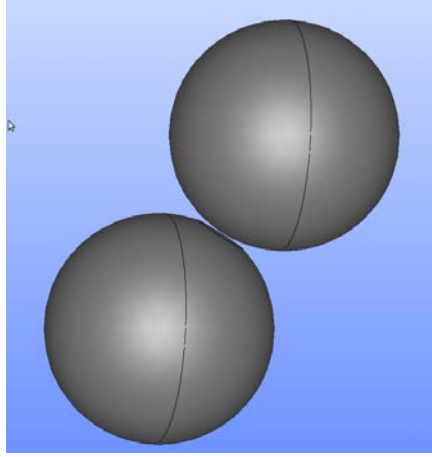


Figure 3: Local treatment to avoid contact points and narrow gaps by increasing the gap between particles.

The fluid domain is meshed with tetrahedral elements and the simulations are performed with the commercial solver ANSYS Fluent 13.0. In this study the considered fluid is air. A mass flow is imposed at the periodic faces and a constant heat flux is set at the tube wall. Particles are considered to be adiabatic

Case	Mesh elements (tetrahedra)	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle \bar{\theta} \rangle^i$	$\langle \overline{u'_r \theta'} \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i$
1	28 millions to 51 millions	0.18%	0.29%	8.47%	0.69%
2	22.5 millions to 42.5 millions	0.16%	0.04%	2.36%	0.50%

Table 2: The mean error on the radial profile of REV-averaged quantities when refining the computational grid.

and a zero flux is set on their surfaces. The flow and temperature fields are obtained solving the Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) equations. The turbulence is described with the two equations $k - \epsilon$ model. It is worth noting that the near wall flow completely depends on the local particles configurations (recirculating, squeezed, downward, accelerated or stagnant flow) [31] and the local mesh size is related to the gap size. The wall law has to be adapted to match the local y^+ . The enhanced wall treatment suggested by ANSYS Fluent combines a two layers model with an enhanced wall law. When the mesh is fine enough ($y^+ \approx 1$), a two layers model is used to solve the viscous affected region and when the mesh is coarse a wall function is used to capture the flow dynamic. The proposed near wall treatment is well suited for complex wall flows encountered in packed beds. The default spatial discretization scheme proposed in ANSYS Fluent 13.0, namely the first order upwind scheme is used to solve the momentum, the energy, the turbulent kinetic energy and the dissipation rate equations. The standard scheme is used for the pressure and the pressure-velocity coupling is realized with the SIMPLE scheme.

Mesh convergence study was achieved for REV-averaged quantities (see Section 4). The averaged error on the radial profile of REV-averaged quantities are reported in Table 2. The REV-averaged radial profile of the turbulent thermal diffusion $-\langle \overline{u'_r \theta'} \rangle^i$ is plotted in Figure 4. As expected, one can observe that it is much more difficult to achieve mesh convergence for second order turbulent moments than for the mean flow quantities (Figure 5). But it is observed that a very satisfactory convergence is obtained on all quantities of interest for the present study.

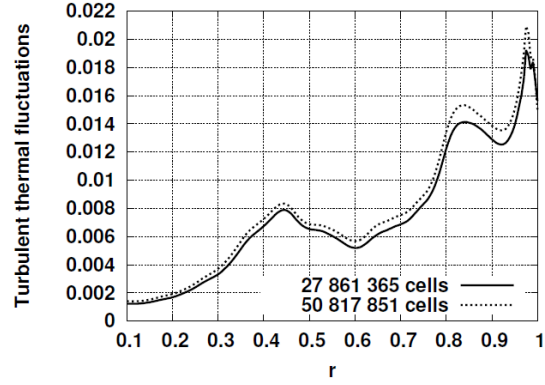


Figure 4: Radial profile of the REV-averaged turbulent thermal diffusion $-\langle u_r' \theta' \rangle^i$ for two mesh densities (Case 1).

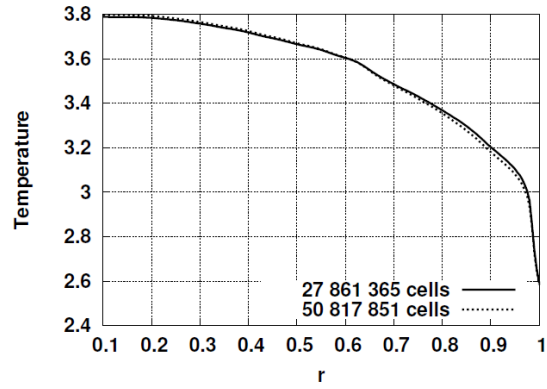


Figure 5: Radial profile of the REV-averaged temperature $\langle \bar{\theta} \rangle^i$ for two mesh densities (Case 2).

4. Extension of the volume averaging concept to wall bounded anisotropic medium

190

The volume averaging concept has been recalled in section 2. However, the appropriate volume which satisfies the scale separation was not discussed above. Such a volume commonly called Representative Elementary Volume (REV) is a key notion as far as porous medium is concerned. The idea behind the concept is that the averaged geometric configuration and effective properties of the entire medium can be statistically deduced from a well defined volume. This leads to a scale separation between effective (macro-scale) and detailed (micro-scale) properties of the considered medium. Thus, flow governing equations are solved only within the REV (micro-scale simulations) to get effective properties of the medium and a new set of equations are derived for the REV filtered effective medium (macro-scale simulations) by applying the volume averaging operator to micro-scale flow governing equations and using simulations carried out in the REV to model sub-filter terms [32]. In this section well suited REV to periodic then to isotropic infinite porous medium are briefly reviewed. Then, an extension of the Representative Elementary Volume concept to wall bounded and anisotropic random medium is presented and the defined set of criteria is validated via numerical simulations.

200

205

4.1. Representative Elementary Volume for infinite ordered media and infinite random media

As demonstrated in [33, 34], for an infinite ordered medium as for instance periodic rows of solid objects, a suitable Representative Elementary Volume (REV) is the smallest pattern one can find to reproduce the entire medium. Thus, a single pattern can be considered as the elementary representative volume of the medium. All effective properties of mass, momentum and heat transport in the entire medium can be obtained performing simulations only within the chosen REV. As far as isotropic random medium is concerned, the Representative Elementary Volume has to be wide enough to contain within it

as many different configurations as needed to be statistically representative of the medium. This leads to the following constraint that requires the characteristic length of the Representative Elementary Volume l_{REV} to be much wider than both the pore l_p and the particle l_d length scales.

$$l_{REV} \gg \text{MAX}\{l_p, l_d\} \quad (30)$$

210 In other words, the REV is the smallest volume which can be statistically considered to be a pattern. It is statistically meaningful to replicate the pattern and thus reproduce the whole medium.

4.2. Suitable Representative Elementary Volume (REV) for anisotropic porous medium

215 As for a low N tubular packed bed of spherical particles [35] or perforated cylindrical particles, present configurations exhibit radial packing anisotropy as it is shown by the radial profile of the porosity (Figure 6). The porosity is equal to one at the vicinity of the wall and decreases with a sharp slope from the wall up to a distance of approximately $d_p/2$. Then, it follows an oscillating, smoothly
220 damped behavior towards the tube centre. It is also worth nothing that the porosity and the mean axial velocity radial profiles are very similar showing hence how deeply the radial anisotropy affects the flow dynamic (Figure 7).

As the packing is considered homogeneous in the axial and azimuthal directions, a tubular shaped REV is well suited to the packed bed system (Figure
225 8). The length L is required to be large enough to make the REV statistically meaningful.

$$L(r) \gg \text{MAX}\{l_p, l_d\} \quad \forall r \quad (31)$$

The thickness d has to be small enough to capture the radial heterogeneity and at the same time wide enough to be greater than the pore scale. Thus, d is constrained to lie between the pore and radial anisotropy length scales.

$$l_p \leq d \leq l_{ih} \quad (32)$$

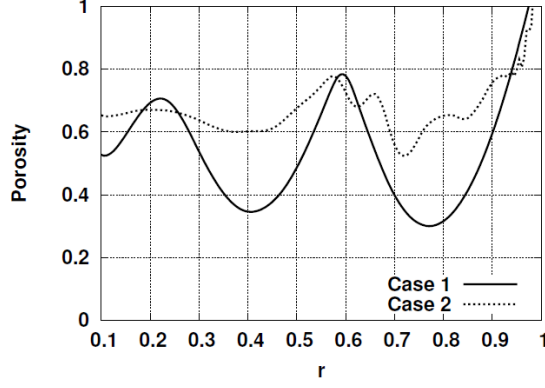


Figure 6: Porosity Profiles

An additional constraint is required to have a constant REV V_0 at any radial position r .

$$V_0 = 2\pi r d(r) L \quad (33)$$

with $d(r) = d_R \cdot \left(\frac{R}{r}\right)$, where d_R is the thickness of the REV lying along the tube. At the tube center, the REV is a cylinder.

To ensure that the chosen L and d are meaningful, it is worth to carry out a REV convergence study. Tacking different sizes for d , one can assume that the REV thickness fulfills the constraints (32), as soon as decreasing further d generates small fluctuations around the mean profile. Figure 9 shows that the radial profile of the REV-averaged thermal dispersive fluctuation $-\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i$ depends on the chosen REV thickness d . But one can also notice that REVs denoted by $d3$ ($d_R^* = 2$ mm) and $d4$ ($d_R^* = 4$ mm) are characterized by a thickness larger than the radial anisotropy length scale l_{ih} . As for the REV denoted by $d1$ ($d_R^* = 0.04$ mm), its thickness is thinner than the pore scale, fluctuations revealing that the pore scale is reached. Hence one can deduce that the thickness of REV denoted by $d2$ ($d_R^* = 1$ mm) is the one satisfying (32). As for L , the constraint (31) is achieved as soon as increasing L do not change qualitatively and quantitatively the mean quantity profile. In practice, it is

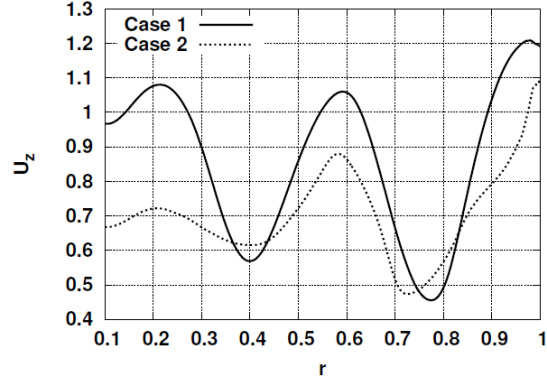


Figure 7: Velocity Profiles. Mass flow = 0.1.

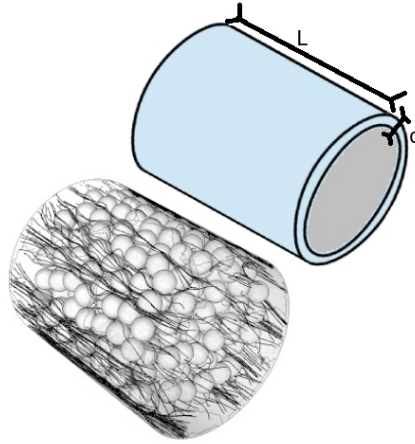


Figure 8: Appropriate REV for tubular packed beds

245 difficult to reach a quantitatively converged mean quantity and we assume that
 the convergence is reached when the error between REV averaged quantities
 for consecutively increased L is below a convergence threshold. For instance,
 Figure 10 and Figure 11 show how the difference between REV averaged values
 decreases when the length L is successively increased. The evaluated error in
 250 % at a position L on the abscissa is the mean error between radial profiles of

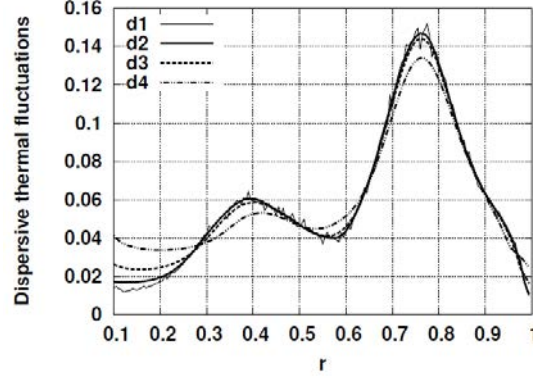


Figure 9: Averaged radial profile of the thermal dispersive fluctuation $-\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i$ for different REV thicknesses $d1 < d2 < d3 < d4$. (Case 1)

averaged quantities in REV's with a length of $L + \Delta L$ and L , where $\Delta L \approx d_p/2$. One can assume that the convergence is reached for the porosity and the averaged axial velocity as soon as the difference observed is below a certain percentage. It is also worth noting that a large L is required to meet REV convergence with volume averaged second order moments such as REV averaged Reynolds stress tensor components than with a zero order moment such as the mean velocity. Hence, for a turbulent flow, the meaningful L is the one for which the volume averaged second order moments reach the convergence (Figure 11 and Table 3).

$L \rightarrow L + \Delta l$	ϕ	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle \bar{\theta} \rangle^i$	$\langle \bar{u}_r' \bar{\theta}' \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i$
0.0125 $\rightarrow$ 0.025	2.45%	1.7%	3%	10.2%	16.9%
0.025 $\rightarrow$ 0.05	3.1%	2.6%	4.7%	14.3%	50.4%
0.05 $\rightarrow$ 0.1	2.3%	2.5%	8.1%	20%	45.2%
0.1 $\rightarrow$ 0.15	2.1%	1.1%	7%	12.2%	10.4%
0.15 $\rightarrow$ 0.2	1.8%	1.8%	4.1%	11.9%	10.7%
0.2 $\rightarrow$ 0.25	1.34%	1.3%	4.1%	9.5%	10.6%
0.25 $\rightarrow$ 0.3	1.1%	1.2%	2.8%	6.8%	8.5%
0.3 $\rightarrow$ 0.35	0.7%	1.4%	1%	5.9%	10.1%
0.35 $\rightarrow$ 0.4	0.47%	0.9%	1.6%	6%	15%
0.4 $\rightarrow$ 0.45	0.69%	0.7%	1.4%	5%	5%
0.45 $\rightarrow$ 0.5	0.65%	0.6%	1.1%	4%	10%
0.5 $\rightarrow$ 0.55	0.53%	0.75%	1%	5%	13%
0.55 $\rightarrow$ 0.6	0.56%	0.67%	1.2%	7%	9%
0.6 $\rightarrow$ 0.65	0.68%	0.76%	0.8%	5%	4%
0.65 $\rightarrow$ 0.7	0.54%	0.64%	1.2%	2.6%	11%
0.7 $\rightarrow$ 0.75	0.4%	0.6%	0.6%	2.3%	8.4%
0.75 $\rightarrow$ 0.8	0.5%	0.47%	0.8%	4%	7.8%
0.8 $\rightarrow$ 0.85	0.55%	0.5%	0.7%	2.1%	6.1%
0.85 $\rightarrow$ 0.9	0.45%	0.8%	1%	2.5%	6.5%
0.9 $\rightarrow$ 0.95	0.3%	0.9%	1.4%	1.7%	6%
0.95 $\rightarrow$ 1	0.4%	0.7%	0.6%	2.8%	4.6%

Table 3: Mean error(in %) on the radial profile of REV-averaged quantities when increasing the REV length from L to $L + \Delta l$. (Case 2)

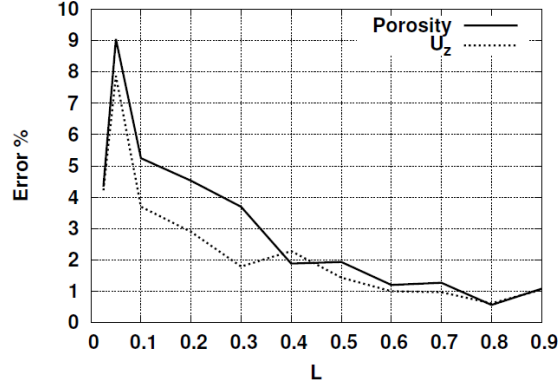


Figure 10: Evaluation of the mean difference between radial profiles of REV averaged quantities (porosity and mean axial velocity) when changing the REV length L (Case 1).

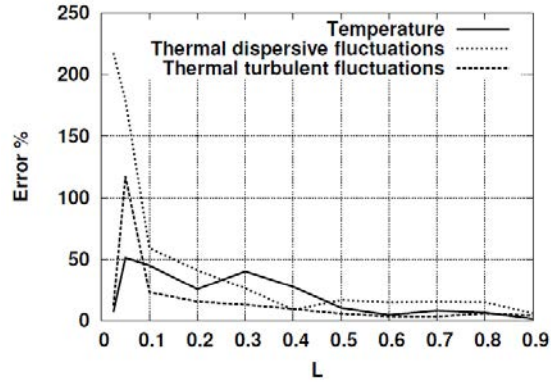


Figure 11: Evaluation of the mean difference between radial profiles of REV averaged quantities (temperature and second order moments) when changing the REV length L (Case 1).

5. Physical analysis of the tube Nusselt number

5.1. Validation of the numerical evaluation of non local Nusselt number

The new non-local expression (29) is an exact equation, which must be evaluated using numerical quadrature. The validation of the results given by the non local expression is carried out by comparing it to the usual Nusselt expression obtained from 3D simulations,

$$Nu_{ref} = \frac{Q^* d_t^*}{\lambda_f^* (\langle \bar{T}_w \rangle^* - \langle \bar{T}_b \rangle^{i*})} \quad (34)$$

where Q^* is the imposed heat flux per surface unit at the tube wall (Table 4).

Case	Re_p	Nu_{ref}	$Nu_{non-local}$	Error (%)
1	3921	433.66	433.61	0.01%
	7819	667.45	660.8	1%
	15608	1040.7	1025.7	1.44%
	31180	1671.67	1700	1.7%
2	3953	376.35	390.0	3.62%
	7892	599.56	619.87	3.39%
	16700	1041.21	1085.22	4.23%
	31482	1684.55	1772.05	5.2%

Table 4: The non-local expression of the Nusselt number compared to the reference Nusselt number.

5.2. Physical analysis

The non local expression points out five physical mechanisms responsible for the radial heat transfer which are respectively conduction (I), turbulent mixing (II), dispersive mixing (III), radial convection (IV) and mean velocity deviation (V). Figures 12 and 13 display the evolution of the weighted contribution of each of those physical mechanisms and the Nusselt number from a radial position r to the wall. For instance, the plotted dispersive contribution denoted as *III* is

the following term:

$$III(r) = \frac{2Re \cdot Pr}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \int_r^1 r \phi [\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i] dr \quad (35)$$

and the Nusselt number profile is obtained with the following expression:

$$Nu(r) = \frac{2}{\langle \bar{\theta}_b \rangle^i} \left(- \int_r^1 r \phi \left[\frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{\theta} \rangle^i + \frac{1}{V} \int_{A_i} n_r \delta \bar{\theta} dS \right] dr \right. \\ \left. + Re \cdot Pr \int_r^1 r \phi \left[\langle \bar{u}_r' \bar{\theta}' \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{\theta} \rangle^i + \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{\theta} \rangle^i + \delta \langle \bar{u}_z \rangle^i r \right] dr \right) \quad (36)$$

These figures clearly show that the main contributions to the Nusselt number
 265 are the velocity inhomogeneity and the dispersive mixing which prevail over
 other ones highlighting how the radial anisotropy and the mechanical dispersion
 in the packed bed are essential to convey the heat from the wall towards the
 bed. For the packed bed with spherical particles for instance, the mean velocity
 inhomogeneity and the dispersive contribution represent respectively 67.8% and
 270 25.9% of the total contribution of the Nusselt number for a Reynolds number
 based on the equivalent diameter Re_p of 15600 ($Re_p = Re/N$). Moreover, it
 is worth noting that the establishing profile of the Nusselt number covers the
 whole medium from the tube wall to the center of the bed underlying that
 the whole medium is involved. However, as indicated by the profile slope, the
 275 contribution to the Nusselt number decreases when going away from the wall.
 The heat transfer processes occurring in the near wall region contribute more
 significantly to the wall heat transfer than those occurring in the duct core
 region. Indeed, if we take the example of the catalyst bed of spherical particles
 (Case 1) at $Re_p = 15600$, 73% of the Nusselt number value is reached at a
 280 distance of d_p from the wall. It is hence emphasized that the wall heat transfer
 is correlated to the whole bed thermal conductivity efficiency but weighted by
 the radial position.

Considering the ratio between the derivative of Eq. (36) and Eq. (36)
 ($\Delta Nu = \frac{1}{Nu} \frac{dNu}{dr}$), one can capture the existence of a thermal resistance in the
 285 near wall region (Figure 14 and 15). Indeed, from the wall up to a distance of
 $d_p/2$ for the packing with spheres and up to a distance of approximately $3d_p/4$

for the packing of perforated cylinders, the rate of the Nusselt number growth from the wall is stiffly damped. Comparing this ratio for each contributions, the turbulent mixing and the velocity inhomogeneity seem to be mainly affected
290 by the near wall thermal resistance which is responsible for the damping of the growth rate in this region. However, the dispersion contribution shows a relatively smooth decrease when moving from the wall underlying that an high dispersive heat transfer is kept over this region. The decrease is even very light from the wall up to a distance of about $3d_p/4$ in the case of the packed bed of
295 spherical particles.

The main features described for the packing of spherical particles are also found in the packed bed of perforated cylinders showing that the general physical mechanisms which drive the wall heat transfer are the same in both configurations. However, as the shape influence has an impact on the packing
300 heterogeneity as evidences the porosity profile, the near wall thermal resistance observed in Figure 15 displays a very stiff decrease from the wall up to a distance of $d_p/8$ and then a less steeper one up to $3d_p/4$. As for the derivative of the dispersive contribution, it still keeps its transfer strength over this region compared to the other contributions but not as efficiently as in the spherical
305 packing configuration. One can hence deduce that changing the particle shape, the wall heat transfer mechanisms can be modified to stick for instance the near wall resistance in a thin layer close to the wall .

It is also worth noting that the region from the wall up to a distance of $d_p/2$ is characterized by a steep decrease in the porosity and in the streamwise velocity
310 (Figures 6 and 7) indicating that the near wall macroscopic shear flow which is decreasing when moving away from the wall and the near wall channeling effect could be responsible for the thermal resistance occurring in this region, but more evidences are required to draw a definitive conclusion.

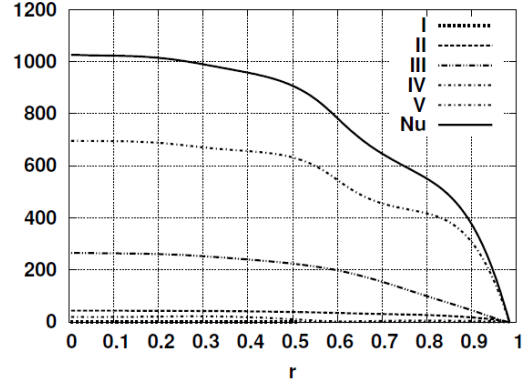


Figure 12: Physical contributions to the Nusselt number (Case 1). $Re_p \approx 16000$

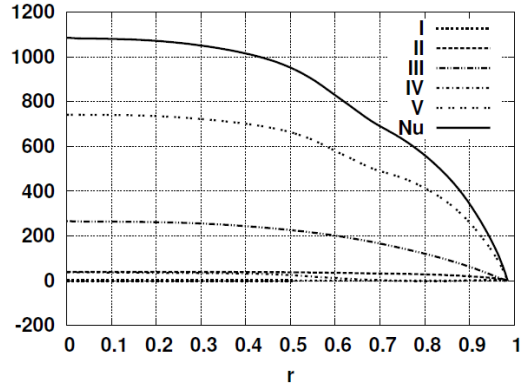


Figure 13: Physical contributions to the Nusselt number (Case 2). $Re_p \approx 16000$

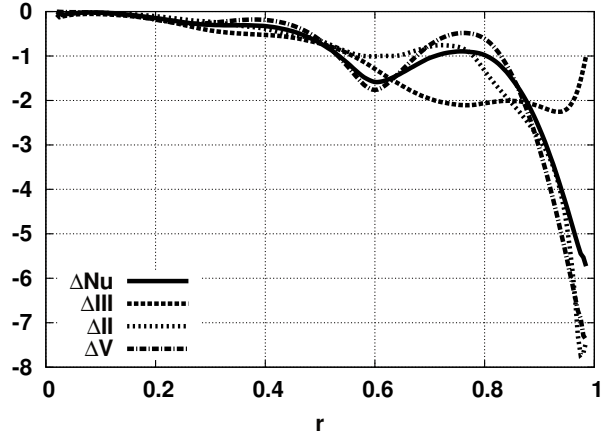


Figure 14: Radial derivative of the Nusselt number and of its main physical contributions (Case 1). $Re_p \approx 16000$

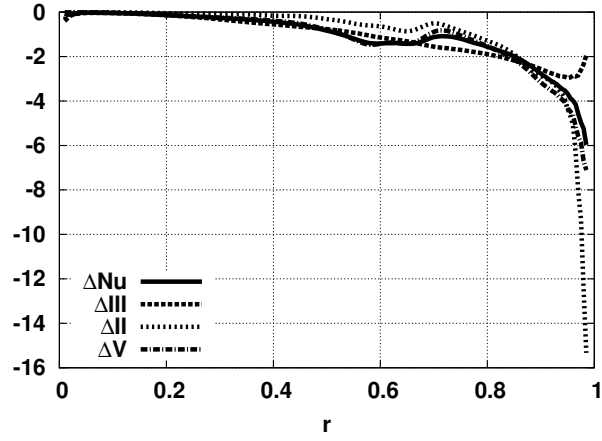


Figure 15: Radial derivative of the Nusselt number and of its main physical contributions (Case 2). $Re_p \approx 16000$

6. Empirical modeling for the Nusselt number

315 The Nusselt number can be simply correlated to the Reynolds number by a
 expression in the form αRe_p^β , with $Re_p = d_p^* U_b^* / \nu^*$ (see [1, 36] for an overview).
 Such correlations can be obtained for the two cases discussed in this study
 (Figures 16 and 17).

$$Nu = 2.16 \cdot Re_p^{0.64} \quad (\text{for spheres}) \quad (37)$$

$$Nu = 0.79 \cdot Re_p^{0.74} \quad (\text{for perforated cylinders}) \quad (38)$$

As it was shown that the main contributions to the Nusselt number are the mean
 320 velocity deviation and dispersive mixing, we obviously find that the packing
 made with spherical particles and the one obtained with pellets have different
 correlations. Indeed, when the shape of the particle changes, the mechanical
 deviation of the flow is affected and the wall heat transfer is then impacted.
 It clearly points out that the particle shape can be considered as one of the
 325 key factors to improve the wall heat transfer. The better the particle ability to
 scatter the flow field, the better the wall heat transfer.

Most of the available correlations for packed beds of spherical particles
 are obtained empirically for relatively low Reynolds numbers. Some of them
 are presented in Table 5. The existing scatter between those correlations are
 330 highlighted in Figure 18. All of these correlations measure the temperature
 jump between the wall temperature and the extrapolated wall fluid tempera-
 ture $Nu_p = \frac{Q^* d_p^*}{\lambda_f (T_w^* - T_f^*(r^* = R^*))}$ except the one presented in this study and the
 one denoted as Nu_7 which measure the jump between the wall and bulk temper-
 atures $Nu_p = \frac{Q^* d_p^*}{\lambda_f^* (T_w^* - T_b^*)}$. One can notice that the correlation obtained via 3D
 335 numerical simulations is very consistent with the ones found in the literature as
 it follows the same law deduced empirically. Moreover, the trend and the range
 of values are also in agreement with the values found experimentally. One can
 at this point only conclude that it is possible to derive a consistent correlation
 from numerical simulations. The values found for the parameters α and β are

Author	N	Re_p	Correlation
Li and Finlayson [6]	$3 \leq N \leq 20$	$20 \leq Re_p \leq 7600$	$0.17 \cdot Re_p^{0.79}$
Demirel and al. [38]	$4.5 \leq N \leq 7.5$	$200 \leq Re_p \leq 1450$	$0.217 \cdot Re_p^{0.756}$
Dixon and al. [39]	$3 \leq N \leq 12$	$50 \leq Re_p \leq 500$	$(1 - 1.5N^{-1.5})Pr^{1/3}Re_p^{0.59}$
Dixon [40]	$1.13 \leq N \leq 6.4$	$300 \leq Re_p \leq 3000$	$0.523(1 - N^{-1})Pr^{1/3}Re_p^{0.738}$
Peters and al. [41]	$2.7 \leq N \leq 11$	$200 \leq Re_p \leq 6000$	$4.9N^{-0.26}Pr^{0.33}Re_p^{0.45}$
Present study	5	$3000 \leq Re_p \leq 30000$	$0.432Re_p^{0.64}$ $Nu1 = \frac{Q^* d_p^*}{\lambda_f^* (\langle \bar{T}_w \rangle^* - \langle \bar{T}_b \rangle^{i*})}$

Table 5: Experimental correlations for the wall heat transfer found in the literature and the one derived from numerical simulations in this study.

not validated at this point as there is no empirical correlations available measuring the jump between the bulk and the wall temperatures in the literature for the range of Reynolds investigated. Moreover, the packing we investigated is an idealized one as the mean porosity is higher than the compact one obtained in industrial packed beds. For instance the mean bed porosity for the packing obtained with spheres is equal to $\phi_0 = 0.4954$ whereas the reference value for a loose random packing obtained empirically [37] is equal to $\phi_{ref} = 0.4748$ which shows an error of 4.35%. The overestimated porosity will have an effect on the parameters α and β but this issue is out of the scope of the present work.

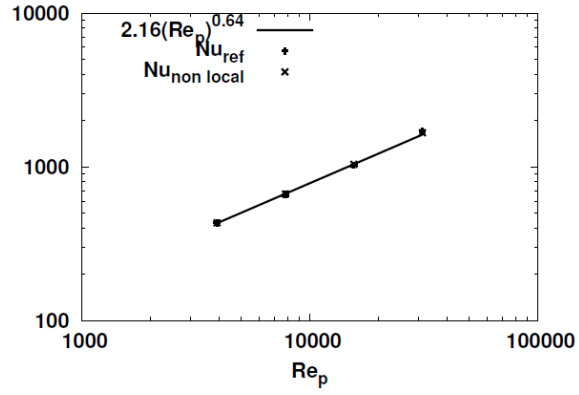


Figure 16: Correlation for the Nusselt number (Case 1).

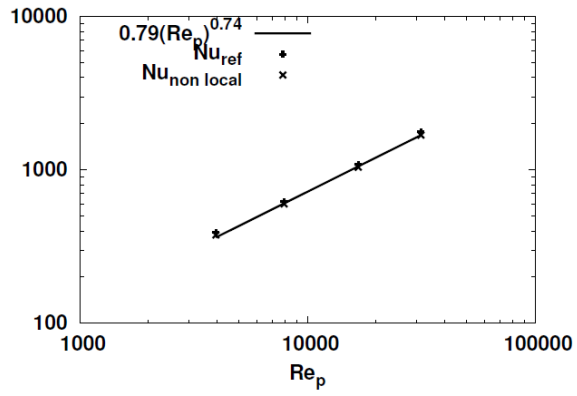


Figure 17: Correlation for the Nusselt number (Case 2).

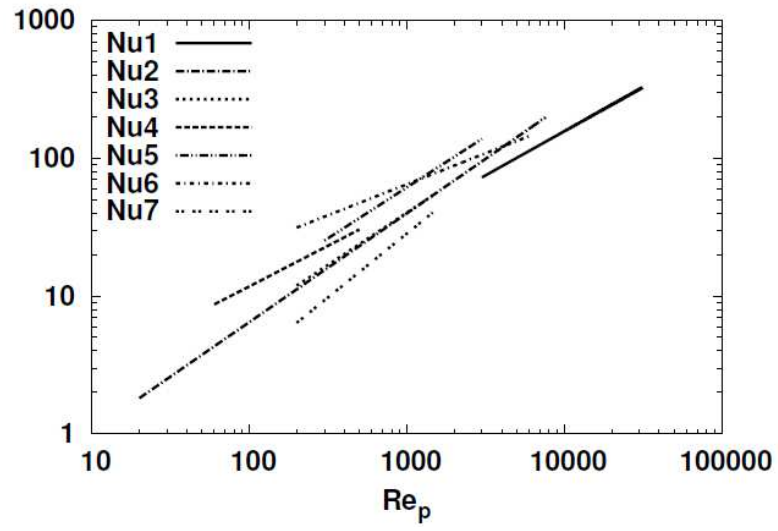


Figure 18: Correlations for the wall Nusselt number of a tubular packed bed with spherical particles. Nu1:Present correlation; Nu2:[6]; Nu3:[38]; Nu4:[39]; Nu5:[40]; Nu6:[41]; Nu7:[38]

7. Conclusion

350 Periodic tubular packed bed of spherical particles on the one hand and the
one with perforated pellets on the other hand were realized. 3D CFD simulations
were then carried out to get detailed information about the flow dynamic and
the thermal field in the fluid domain. The data was unequivocally up-scaled
355 to the observation scale with the REV concept, which was extended to make
it valid for packed bed configurations. Applying integration operator, an exact
non local expression for the Nusselt number was derived from the up-scaled
governing equation of the temperature field. The obtained expression was able
to clarify the weighted physical mechanisms' contributions to the wall heat
transfer. The flow inhomogeneity and the mechanical dispersion were identified
360 to be the main processes bringing heat from the wall to the bed. It was also
highlighted that the whole medium participates to the wall heat transfer but
not in the same proportion. Indeed, the contribution of physical mechanisms
in the near wall zone are much more important than in the region far from the
wall. However, it was indirectly observed that the very near wall region displays
365 a certain resistance to convey the heat to the bed. This region characterized
by a steep decrease of porosity and streamwise velocity when moving away
from the wall (Figures 6 and 7) can reduce the rate of the heat transfer. The
near wall channeling effect, dragging the heat along the streamwise direction,
seems to weaken the amount of heat conveyed in the radial direction. But more
370 investigations are needed to confirm the near wall channeling effect on the near
wall heat transfer.

Acknowledgment

Mr. Thiagalingam acknowledges the financial support of "Paris-Saclay Re-
search Center - Air Liquide" for his work as a PhD Candidate at Université
375 Pierre et Marie Curie.

References

- [1] A. D. Dixon, Fixed bed catalytic reactor modelling - the radial heat transfer problem, Canadian J. Chem. Eng. 90 (2012) 507–527.
- [2] A. D. Dixon, G. Walls, H. Stanness, M. Nijemeisland, E. H. Stitt, Experimental validation of high reynolds number cfd simulations of heat transfer in a pilot-scale bed tube, Chem. Eng. J. 200-202 (2012) 344–356.
- [3] G. Froment, Analysis and design of fixed bed catalytic reactors, Chem. Reaction Eng. 109 (1972) 1–55.
- [4] S.Ergun, Fluid flow through packed columns, Chem. Eng. Prog. 48 (1952) 89–94.
- [5] A. D. Wasch, G. Froment, Heat transfer in packed beds, Chem. Eng. Sci. 27 (1972) 567–576.
- [6] C. Li, B. Finlayson, Heat transfer in packed beds- a reevaluation, Chem. Eng. Sci. 32 (1977) 1055–1066.
- [7] J. Beek, Design of packed catalytic reactors, Adv. Chem. Eng. 3 (1962) 203–271.
- [8] C. von Scala, M. Wehrli, G. Gaiser, Heat transfer measurements and simulation of katapak-m catalyst supports, Chem. Eng. Sci. 54 (1999) 1375–1381.
- [9] I. Ziolkowska, D. Ziolkowski, Fluid flow inside packed beds, Chem. Eng. Process. 23 (1988) 137–164.
- [10] T. Atmakidis, E. Kenig, Cfd-based analysis of the wall effect on the pressure drop in packed beds with moderate tube/particle diameter ratio in the laminar flow regime, Chem. Eng. J. 155 (2009) 404–410.
- [11] O. Bey, G. Eigenberger, Fluid flow through catalyst filled tubes, Chem Eng. Sci. 52 (1997) 1365–1376.

- [12] F. Mathey, Numerical up-scaling approach for the simulation of heat-transfer in randomly packed beds, *Int. J. heat mass trans.* 61 (2013) 451–463.
- 405 [13] M. Winterberg, E. Tsotsas, Correlations for the effective heat transport coefficients in beds packed with cylindrical particles, *Chem. Eng. Sci.* 55 (2000) 5937–5943.
- [14] M. Winterberg, E. Tsotsas, A. Krischke, D. Vortmeyer, A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres, *Chem. Eng. Sci.* 55
410 (2000) 967–979.
- [15] M. Freiwald, W. Paterson, Accuracy of model prediction and reliability of experimental data for heat transfer in packed beds, *Chem. Eng. Sci.* 47 (1992) 1545–1560.
- 415 [16] J. Borkink, K. R. Westerterp, Influence of tube and particle diameter on heat transport in packed beds, *AIChE Journal* 38 (1992) 703–715.
- [17] K. Vakhshouri, M. M. Hashemi, Simulation study of radial heat and mass transfer inside a fixed bed catalytic reactor, in: *International Science Index, World Academy of Science, Engineering and Technology*, 2007.
- 420 [18] K. Fukagata, K. Iwamoto, N. Kasagi, Contribution of reynolds stress distribution to the skin friction in wall-bounded flows, *Phys. Fluids* 14 (2002) L73–L76.
- [19] N. Kasagi, Y. Hasegawa, K. Fukagata, K. Iwamoto, Control of turbulent transport : Less friction and more heat transfer, *J. Heat Transfer* 134 (2012) 031009.
425
- [20] Y. Peet, P. Sagaut, Theoretical prediction of turbulent skin friction on geometrically complex surfaces, *Phys. Fluids* 21 (2009) 105105.

- [21] S. Monte, T. Gomez, P. Sagaut, Analysis of turbulent skin friction generated in flow along a cylinder, *Phys.Fluids* 23 (2011) 061706.
- 430 [22] T. Gomez, V. Flutet, P. Sagaut, Contribution of reynolds stress distribution to the skin friction in compressible turbulent channel flows, *Phys. Rev. E* 79 (2009) 035301.
- [23] K. Fukagata, K. Iwamoto, N. Kasagi, Novel turbulence control strategy for simultaneously achieving friction drag reduction and heat transfer augmentation, in: *Proc. 4th Int. Symp. Turbulence and Shear Flow Phenomena*, 2005.
- 435 [24] M. D. Lemos, *Turbulence in porous media, modeling and applications*, Elsevier, 2006.
- [25] W. G. Gray, P. C. Y. Lee, On the theorems for local volume averaging of multiphase systems, *Int. J. Multiphase Flow* 3 (1977) 333–340.
- 440 [26] R. Caulkin, M. Fairweather, X. Jia, R. Williams, A numerical case study of packed columns, in: *European Symposium on Computer Aided process Engineering*, Elsevier Science B.V., 2005.
- [27] R. Caulkin, A.Ahmad, M. Fairweather, X. Jia, R. Williams, Digital prediction of complex cylinder packed columns, *Comp. and Chem. Eng.* 33 (2009) 10–21.
- 445 [28] X. Jia, R. Williams, A packing algorithm for particles of arbitrary shapes, *Powder Technology* 120 (2001) 175–186.
- [29] X. Jia, M. Gan, R. Williams, D. Rhodes, Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities, *Powder Technology* 174 (2007) 10–13.
- 450 [30] A. G. Dixon, M. Taskin, M. Nijemeisland, E. Stitt, Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: single sphere study, *Comp. Chem. Eng.* 35 (2011) 1171–1185.

- 455 [31] M. Nijemeisland, A. G. Dixon, Comparison of cfd simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, *Chem. Eng. J.* 82 (2000) 231–246.
- [32] A. N. ad F. Kuwahara, A macroscopic turbulence model for flow in a porous media, *J. Fluid Eng.* 121 (1999) 427–433.
- 460 [33] M. Quintard, S. Whitaker, Transport in ordered and disordered porous media i: the cellular average and the use of weighting functions, *Transport in Porous Media* 14 (1994) 163–177.
- [34] M. Quintard, S. Whitaker, Transport in ordered and disordered porous media ii: generalized volume averaging, *Transport in Porous Media* 14 (1994) 179–206.
- 465 [35] M. Behnam, A. Dixon, M. Nijemeisland, E. H. Stitt, A new approach to fixed bed radial heat transfer modeling using velocity fields from computational fluid simulations, *Ind. Eng. Chem. Res.* 52 (2013) 15244–15261.
- [36] D. Wen, Y. Ding, Heat transfer of gas flow through a packed bed, *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006) 3532–3542.
- 470 [37] R. P. Zou, A. B. Yu, The packing of spheres in a cylindrical container: the thickness effect, *Chem. Eng. Sci.* 50 (1995) 1504–1507.
- [38] Y. Demirel, R. Sharma, H. Al-Ali, On the effective heat transfer parameters in a packed bed, *Int. J. Heat Mass Transfer* 43 (2000) 327–332.
- 475 [39] A. Dixon, M. A. DiCostanzo, B. Soucy, Fluid-phase radial transport in packed beds of low tube-to-particle diameter ratio, *Int. J. Heat Mass Transfer* 27 (1984) 1701–1713.
- [40] A. Dixon, Heat transfer in fixed beds at very low (< 4) tube-to-particle diameter ratio, *Int. Eng. Chem. Res.* 36 (1997) 3053–3064.
- 480 [41] P. Peters, R. Schifano, P. Harriott, Heat transfer in packed tube reactors, *Int. Eng. Chem. Res.* 27 (1988) 226–233.

3.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons brièvement rappelé l'état de l'art de la modélisation des transferts thermiques dans les réacteurs tubulaires à l'aide de modèles classiques (modèles simplifiés à deux coefficients $\lambda_r - h_w$) et souligné les points bloquants pouvant mettre en péril leur utilisation fiable et pérenne au niveau industriel. En effet, le modèle à deux coefficients reposant sur des hypothèses qui sont invalides pour les configurations industrielles couramment rencontrées ne peut correctement estimer les transferts de chaleur à l'intérieur des réacteurs tubulaires. De plus, le caractère épars des corrélations existant dans la littérature pour décrire ces coefficients démontre que les mécanismes physiques pilotant le transfert de chaleur dans ce type de milieu reste encore méconnus. De nouvelles approches doivent être développées pour comprendre la complexité des mécanismes intervenant et saisir leur rôle et leur importance relative afin de construire des modèles plus robustes et fiables. Dans cet état d'esprit, nous avons réalisé une étude approfondie des mécanismes physiques pilotant le transfert à la paroi. Ceci a permis de mettre en évidence cinq différents mécanismes pilotant le transfert à la paroi ainsi que leur importance relative. Il a de plus été montré qu'il était possible de dériver des corrélations simples à partir des données produites par la simulation numérique (CFD). En effet, on montre par exemple dans cette étude que la forme des corrélations empiriques proposée dans la littérature peut être retrouvée à partir des équations fondamentales régissant le transport de chaleur à l'échelle des pores. Cette approche alternative doit cependant être davantage développée pour être en mesure de produire des corrélations fiables.

Chapitre 4

Modélisation macroscopique de la turbulence et de la dispersion mécanique dans des lits catalytiques confinés

Sommaire

4.1	Introduction	125
4.2	Étude bibliographique	125
4.2.1	Modèle de Nakayama and al.[77]	126
4.2.2	Modèle de Teruel et al.[82, 83, 84, 85]	128
4.3	Modèle $\langle K \rangle - \langle \epsilon_T \rangle$	130
4.3.1	Énergie cinétique turbulente macroscopique	131
4.3.2	Energie cinétique dispersive	132
4.3.3	Energie cinétique totale	137
4.3.4	Le taux de dissipation turbulente macroscopique	138
4.3.5	Le taux de dissipation dispersive	140
4.3.6	Relations de fermeture	140
4.4	Validation du modèle macroscopique	149
4.4.1	Modèle macroscopique	149
4.4.2	Validation	153
4.5	Conclusion	160

4.1 Introduction

Dans les conditions opératoires, le mélange gazeux peut être injecté dans les réacteurs tubulaires à des Reynolds allant de 2000 à 15000 ($Re_p = \frac{U_s d_p}{\nu}$ avec U_s la vitesse superficielle et d_p le diamètre équivalent du catalyseur). La traversée du tube se fait donc à un régime turbulent plutôt modéré. Ce régime est généralement choisi de sorte que le mélange turbulent puisse améliorer le transport de la chaleur depuis la paroi vers l'intérieur tout en maintenant les pertes de charge à des valeurs raisonnables. La compréhension et la modélisation de l'écoulement turbulent à travers les lits catalytiques est une étape majeure pour comprendre les transferts de chaleur, étant donné que l'essentiel du transfert se fait par le transport turbulent et la dispersion mécanique.

On appelle dispersion mécanique les fluctuations spatiales induites sur les différents champs RANS, $\delta\bar{\psi}$, par la matrice solide. Elle permet notamment d'améliorer les transferts (de quantité de mouvement, d'espèces, de la chaleur) en accentuant le mélange. Si le caractère désordonné de la matrice solide permet d'améliorer les différents transferts notamment par la dispersion, le confinement de la matrice solide dans un récipient tubulaire compromet ce caractère désordonné créant des effets de canalisation. Cela se traduit, notamment dans la région proche paroi, par une résistance aux différents transferts s'opérant dans la direction radiale.

L'objectif de ce chapitre est d'incorporer les différents effets de la matrice solide dans les équations gouvernant la dynamique d'un écoulement turbulent à l'échelle macroscopique. Les mécanismes de dispersion et les effets de canalisation sont mis en évidence et intégralement modélisés afin d'évaluer leur contribution respective aux mécanismes de transfert. L'établissement des équations gouvernant la turbulence et la dispersion mécanique en régime turbulent à l'échelle macroscopique permet par ailleurs de fermer les équations de Navier-Stokes dérivées à l'échelle macroscopique dans la section 2.3.1.

4.2 Étude bibliographique

De nombreuses études expérimentales [69, 70, 71, 72] sur les écoulements dans des milieux assimilables aux milieux poreux ont confirmé l'existence de structures turbulentes dès lors que le nombre de Reynolds basé sur la taille des pores atteint quelques centaines ($Re_{pore} > 300$). Masuoka et al.

[73] posent alors l'hypothèse que la déviation à la loi de Darcy observée est une conséquence de la dynamique locale de structures turbulentes se développant avec le nombre de Reynolds à l'intérieur des pores. Considérant l'importance pratique de développer un modèle de turbulence à l'échelle macroscopique, notamment pour correctement décrire le transport de chaleur et de masse à travers le milieu poreux [74, 75], un modèle de turbulence macroscopique à deux équations est développé ($k - \epsilon$ macroscopique). Les équations gouvernant l'évolution de l'énergie cinétique turbulente et du taux de dissipation sont ainsi dérivées à l'échelle macroscopique d'une part en appliquant la décomposition de Reynolds à l'équation du moment à l'échelle macroscopique [76], d'autre part en appliquant la moyenne volumique au système des équations de Navier-Stokes incompressibles RANS et aux équations d'évolution gouvernant l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation turbulente à l'échelle du pore [77, 78, 79, 80]. Il a ensuite été montré que l'ordre d'application des filtres (moyenne temporelle et moyenne volumique) n'a aucune influence sur les équations de Navier-Stokes macroscopiques lorsque l'on étudie des écoulements incompressibles et turbulents dans des milieux poreux rigides [81].

4.2.1 Modèle de Nakayama and al.[77]

Le milieu poreux considéré est un milieu infini et ordonné. Le système des équations de Navier-Stokes à l'échelle macroscopique est obtenu en appliquant la moyenne volumique au système des équations de Navier-Stokes incompressibles RANS gouvernant la dynamique à l'échelle du pore. Ce système contient des termes additionnels découlant de l'application de la moyenne volumique, à savoir des termes surfaciques et des termes contenant les moments d'ordre deux caractérisant les corrélations de fluctuations spatiales des composantes du champ de vitesse RANS. Ces deux types de termes sont rassemblés et modélisés par une loi de type Darcy-Forchheimer.

De même, l'application de la moyenne volumique à l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente et à l'équation d'évolution du taux de dissipation turbulente à l'échelle du pore fait apparaître des termes additionnels (termes surfaciques et corrélations de fluctuations spatiales). Les termes sous forme de divergence de moments d'ordre deux sont interprétés comme étant de la dispersion d'énergie cinétique turbulente ou de taux de dissipation turbulente et sont modélisés sous la forme d'une divergence d'un flux dispersif. Le flux dispersif est le tenseur de dispersion multiplié par le gradient de la

quantité dispersée représentant respectivement l'énergie cinétique turbulente macroscopique et le taux de dissipation macroscopique. Les termes restants sont interprétés comme étant soit de la production soit de la dissipation engendrée par la matrice solide et l'application de la moyenne volumique. Ces termes sont regroupés et donnent lieu à une production effective de sous-filtre dans chacune des équations.

En remarquant que pour un écoulement complètement développé, unidirectionnel et périodique à l'échelle macroscopique, les termes de cisaillement macroscopique et de développement dans l'espace ($\frac{\partial \langle \cdot \rangle}{\partial x_i}$) s'annulent, l'équation d'évolution de l'énergie cinétique turbulente macroscopique et l'équation du taux de dissipation macroscopique se simplifient grandement. En effet, chacune de ces équations s'écrivent formellement,

$$\text{Production effective de sous filtre} = \text{dissipation} \quad (4.1)$$

Les termes de production effective de sous filtre sont évalués en réalisant une simulation microscopique (résolution des équations RANS et de la turbulence avec le modèle à deux équations $k - \epsilon$) à l'intérieur d'un volume représentatif (VER) du milieu considéré. En effet, en intégrant l'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation turbulente à l'intérieur du VER (respectivement $\langle k \rangle_\infty$ et $\langle \epsilon \rangle_\infty$) et en utilisant l'égalité (4.1), les termes de production effective de sous-filtre s'écrivent,

$$(\text{Production effective de sous-filtre})_k = \langle \epsilon \rangle_\infty \quad (4.2)$$

$$(\text{Production effective sous-filtre})_\epsilon = C_2 \frac{\langle \epsilon \rangle_\infty^2}{\langle k \rangle_\infty} \quad (4.3)$$

Des corrélations peuvent ensuite être dérivées à partir de simulations microscopiques à l'intérieur du VER,

$$\langle k \rangle_\infty = 3.7 \frac{1 - \phi_0}{\phi_0^{1/2}} U_s^2 \quad (4.4)$$

$$\langle \epsilon \rangle_\infty = \frac{39}{d_p} (1 - \phi_0)^{5/2} \phi_0^2 U_s^3 \quad (4.5)$$

avec U_s la vitesse superficielle, ϕ_0 la porosité et d_p la taille de la particule solide. Il faut cependant noter que les corrélations ne sont valides que pour la forme géométrique des particules solides considérée dans cette étude (figure 2.3).

4.2.2 Modèle de Teruel et al.[82, 83, 84, 85]

Teruel propose de ne plus distinguer les fluctuations temporelles des fluctuations spatiales mais de considérer des fluctuations spatio-temporelles qui seraient la différence entre la quantité instantanée et sa moyenne spatio-temporelle.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) + \psi''(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) \quad (4.6)$$

avec

$$\bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \left[\frac{1}{V_f} \int_{V_f} \psi dV \right] d\tau = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \psi d\tau \right] dV \quad (4.7)$$

et

$$\bar{\bar{\psi}}''(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) \cong 0, \quad \bar{\bar{\bar{\psi}}}(\mathbf{x}, t) \cong \bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) \quad (4.8)$$

Une telle formulation permet de prendre en compte l'ensemble des fluctuations générées par l'application des différents opérateurs (moyenne temporelle et moyenne volumique) tout en se préservant de ne faire apparaître aucuns terme volumiques supplémentaires contenant des moments d'ordre deux ou plus dans les équations de Navier-Stokes macroscopiques et les équations d'évolution de l'énergie cinétique turbulente macroscopique et du taux de dissipation macroscopique. Seuls des termes surfaciques additionnels décrivant l'action de la phase solide sur la phase fluide apparaissent. Ceci a l'avantage de conserver la forme bien connue des équations qui régissent les écoulements turbulents en milieu libre augmenté d'un terme de production effective qui décrit l'influence de la matrice solide.

Ce faisant l'énergie cinétique turbulente macroscopique est définie de la façon suivante,

$$k_{Teruel} = \frac{\overline{\overline{u_j'' u_j''}}}{2} \quad (4.9)$$

On s'aperçoit ainsi que cette énergie cinétique contient deux mécanismes physiques de nature différente à savoir l'énergie cinétique turbulente macroscopique qui est la moyenne volumique de l'énergie cinétique turbulente RANS et une énergie cinétique dispersive qui quantifie l'intensité des fluctuations spatiales engendrées par la matrice solide [86].

$$\begin{aligned} k_{Teruel} &= \frac{\langle \overline{u_j' u_j'} \rangle^i}{2} + \frac{\langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i}{2} \\ &= \langle k_{RANS} \rangle^i + \frac{\langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i}{2} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Le taux de dissipation macroscopique est définie avec la même philosophie,

$$\begin{aligned}\overline{\epsilon_{Teruel}} &= \nu \overline{\frac{\partial u_j''}{\partial x_j} \frac{\partial u_j''}{\partial x_j}} \\ &= \langle \epsilon_{RANS} \rangle^i + \nu \langle \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \rangle^i\end{aligned}\quad (4.11)$$

Avec ces nouvelles définitions, le système d'équations du modèle macroscopique s'écrit,

$$\frac{\partial \bar{\bar{u}}_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.12)$$

$$\frac{D \bar{\bar{u}}_i}{Dt} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial (\bar{p} + 2\delta_{ij}/3k_{Teruel})}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\nu + \nu_T) \frac{\partial \bar{\bar{u}}_i}{\partial x_j}] + R_i \quad (4.13)$$

$$\frac{Dk_{Teruel}}{Dt} = -\overline{u_i'' u_j''} \frac{\partial \bar{\bar{u}}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k}) \frac{\partial k_{Teruel}}{\partial x_j}] - \epsilon_{Teruel} - \bar{\bar{u}}_i R_i \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}\frac{D\epsilon_{Teruel}}{Dt} &= -C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon_{Teruel}}{k_{Teruel}} \overline{u_i'' u_j''} \frac{\partial \bar{\bar{u}}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} [(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_\epsilon}) \frac{\partial \epsilon_{Teruel}}{\partial x_j}] \\ &\quad - C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon_{Teruel}^2}{k_{Teruel}} + f(\phi, K) \frac{\epsilon_{Teruel} \sqrt{\overline{u_i u_i}}}{\sqrt{K}}\end{aligned}\quad (4.15)$$

avec

$$R_i = -\frac{1}{\rho \Delta t V_f} \int_{\Delta t} d\tau \int_{A_i} n_i p dS + \frac{\nu}{\Delta t V_f} \int_{\Delta t} d\tau \int_{A_i} n_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} dS \quad (4.16)$$

$$= -\frac{\phi \nu}{K} \bar{\bar{u}}_i - \frac{\phi^2 F}{\sqrt{K}} \bar{\bar{u}}_i \sqrt{\overline{u_i u_i}} \quad (4.17)$$

et,

$$\overline{u_j'' u_i''} = -\nu_T \left[\frac{\partial \bar{\bar{u}}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\bar{u}}_j}{\partial x_i} \right] + \frac{2k_{Teruel}}{3} \delta_{ij}, \quad \nu_T = C_\mu \frac{k_{Teruel}^2}{\epsilon_{Teruel}} \quad (4.18)$$

où K la perméabilité, F la constante de Forchheimer et $f(\phi, K)$ sont dépendant de la morphologie du milieu poreux considéré. Pour la géométrie considérée

par Teruel et al., à savoir une rangée infinie de bâtons de forme carré (figure 2.3), ces paramètres prennent la forme suivante

$$K = \frac{\phi^3}{120(1 - \phi)} H^2 \quad (4.19)$$

$$F = \frac{1}{\sqrt{30}\phi^{3/2}} \quad (4.20)$$

$$f = 0.303C_{\epsilon 2}\phi^{1.482} \quad (4.21)$$

avec H la distance séparant le centre de deux carrés successifs dans la direction orthogonale à l'écoulement.

Il est à noter qu'il existe des études proposant une équation d'évolution séparée pour l'énergie cinétique dispersive [87, 88].

4.3 Modèle $\langle K \rangle - \langle \epsilon_T \rangle$

Nous avons identifié des moments d'ordre deux (voir équation (2.24)) qui représentent des corrélations temporelles et des corrélations spatiales en un point dans les équations de Navier-Stokes macroscopiques. Ces fluctuations qui persistent à l'échelle macroscopique confirment la conservation du caractère turbulent de l'écoulement à ces échelles. Les champs de vitesse macroscopiques sont perturbés d'une part par l'écoulement chaotique régnant à l'échelle du pore et d'autre part par l'aspect chaotique de la distribution des pores et par des interactions de type écoulement/matrice solide.

Ces différentes sources de perturbations, bien que de nature différentes, ne sont pas indépendantes entre elles. En effet, La matrice solide se présente sous forme d'obstacles que l'écoulement doit contourner. Ceci crée localement à l'échelle du pore des zones de recirculation, de cisaillement, de jet, d'accélération et de décélération locales venant perturber la dynamique de la turbulence locale. De plus, la présence de la matrice solide redistribue les lignes du champ de vitesse RANS faisant ainsi rencontrer et interagir des lignes de champs lointains. Ainsi ces corrélations de longue distance donnent naissance à de grandes structures (taille des particules ou du tube). Elles seront d'autant plus importantes que la distribution de la matrice solide est désordonnée et que le nombre de Reynolds est élevé.

Les interférences entre la dynamique pilotant la dispersion et la dynamique pilotant la turbulence semblent ainsi s'effectuer dans les deux sens et

les interactions complexes existant entre ces deux dynamiques excluent la possibilité de traiter ces deux dynamiques de façon séparée et indépendante (voir [87]). De ce fait, l'approche de Teruel et al. consistant à ne plus distinguer la dynamique des fluctuations turbulentes de celle des fluctuations dispersives, mais à considérer des fluctuations au sens général semble convenir à notre étude. En effet, l'énergie cinétique définie par Teruel et al. est une énergie cinétique totale quantifiant l'énergie cinétique des fluctuations turbulentes et dispersives à la fois. Elle permet d'évaluer les fluctuations totales perturbant le champ moyen macroscopique. Ceci à l'avantage de toujours conserver deux équations très similaires aux équations du modèle $k - \epsilon$ tout en décrivant l'évolution de deux phénomènes physiques de nature différentes à l'échelle macroscopique, à savoir la turbulence et la dispersion. Le but de l'étude étant de modéliser correctement le transport de scalaires passifs à travers des lits catalytiques en régime turbulent, il n'est pas nécessaire dans un premier temps de chercher à comprendre et à modéliser l'interaction entre la dynamique turbulente et la dynamique dispersive mais à quantifier leur effets (impact total des fluctuations) sur l'écoulement et le transport à l'échelle macroscopique.

Afin d'établir l'équation d'évolution de l'énergie cinétique et du taux de dissipation des fluctuations totales ($\langle K \rangle$ et $\langle \epsilon_T \rangle$), la stratégie suivante est mise en place. La moyenne volumique est appliquée aux équations gouvernant la turbulence à l'échelle du pore obtenant ainsi les équations gouvernant la turbulence à l'échelle macroscopique. L'équation gouvernant la dispersion est ensuite dérivée à l'échelle macroscopique en suivant la méthode de Pinson [88]. L'énergie cinétique des fluctuations totales et le taux de dissipation associé sont finalement obtenus en sommant la composante turbulente et la composante dispersive.

4.3.1 Énergie cinétique turbulente macroscopique

L'équation gouvernant l'énergie de la fluctuation du champ de vitesse à l'échelle du pore s'écrit (paragraphe 1.4.2, eq.(1.22)),

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla_j k \bar{u}_j = -\nabla_j \left[\frac{\overline{P' u'_j}}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j} \right] + \nu \nabla_j^2 k - \overline{u'_i u'_j} \nabla_j \bar{u}_i - \epsilon \quad (4.22)$$

Appliquons à présent la moyenne volumique à (4.22) :

$$\left\langle \frac{\partial k}{\partial t} \right\rangle^v = \phi \frac{\partial \langle k \rangle^i}{\partial t} \quad (4.23)$$

$$\begin{aligned}
\langle \nabla_j k \bar{u}_j \rangle^v &= \nabla_j [\phi \langle u_j k \rangle^i] + \underbrace{\frac{1}{V} \int \bar{u}_j k n_j dS}_0 \\
&= \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k \rangle^i] + \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_j \delta k \rangle^i]
\end{aligned} \tag{4.24}$$

$$- \langle \nabla_j [\frac{\bar{P}' u'_j}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j}] \rangle^v = - \nabla_j \left(\phi \langle [\frac{\bar{P}' u'_j}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j}] \rangle^i \right) \tag{4.25}$$

$$\nu \langle \nabla_j^2 k \rangle^v = \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k \rangle^i] + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k n_j dS \tag{4.26}$$

En posant $\overline{u'_i u'_j} = R_{ij}$,

$$- \langle \overline{u'_i u'_j} \nabla_j \bar{u}_i \rangle^v = - \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] - \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \tag{4.27}$$

$$- \langle \epsilon \rangle^v = - \phi \langle \epsilon \rangle^i \tag{4.28}$$

En regroupant les différents termes on obtient l'équation gouvernant l'énergie cinétique turbulente à l'échelle macroscopique c'est à dire à l'échelle du milieu poreux.

$$\begin{aligned}
\phi \frac{\partial \langle k \rangle^i}{\partial t} &= - \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k \rangle^i] + \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k \rangle^i] - \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] \\
&\quad - \nabla_j \left(\phi \langle [\frac{\bar{P}' u'_j}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j}] \rangle^i \right) - \phi \langle \epsilon \rangle^i \\
&\quad - \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k n_j dS - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_j \delta k \rangle^i]
\end{aligned} \tag{4.29}$$

On reconnait au second membre respectivement le terme de convection, la diffusion moléculaire, le terme de production, la diffusion turbulente et la dissipation d'énergie qui se retrouvent intacts à l'échelle macroscopique. A cela viennent s'ajouter des termes additionnels découlant de l'application de la moyenne volumique.

4.3.2 Energie cinétique dispersive

On rappelle la définition de l'énergie cinétique dispersive [88],

$$\langle k_d \rangle^i = \frac{1}{2} \langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i \tag{4.30}$$

Il est tout d'abord intéressant de noter que la contribution de l'énergie cinétique dispersive est plus importante que la contribution de l'énergie cinétique turbulente (voir figure 4.1). En effet, l'évaluation de ces différentes énergies cinétiques en appliquant la moyenne volumique sur les résultats de simulations 3D nous apprend que l'énergie cinétique dispersive est environ trois fois plus importante que l'énergie cinétique turbulente pour la configuration d'empilement étudiée. La contribution dispersive représente en effet plus de la moitié de l'énergie cinétique totale pour les types de configurations étudiés. Cette proportion varie avec la taille et la forme des particules solides ainsi qu'avec la porosité moyenne du milieu considéré [83]. La contribution de la partie dispersive augmente avec le nombre de Reynolds au détriment de la partie turbulente comme le souligne la figure 4.2. Cependant, ces différentes énergies cinétiques décroissent lentement avec le nombre de Reynolds [83, 89]. Ces observations soulignent l'importance de la dispersion et justifie la dérivation d'une équation décrivant sa dynamique.

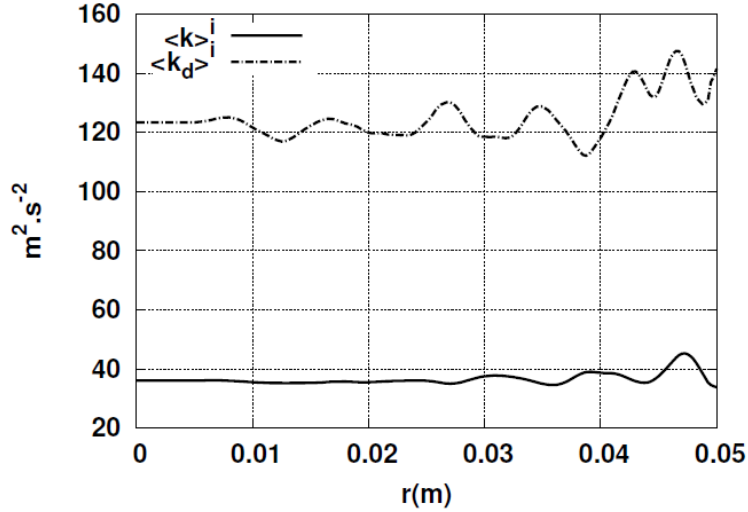


FIGURE 4.1 – Profil radial de l'énergie cinétique turbulente macroscopique $\langle k \rangle^i$ et de l'énergie cinétique dispersive $\langle k_d \rangle^i$ (Cas 2).

L'incompressibilité est une propriété du fluide qui est conservée à l'échelle

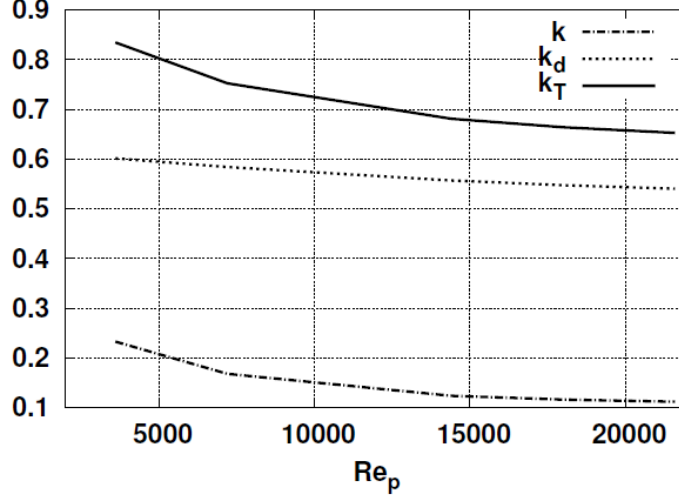


FIGURE 4.2 – Évolution des différentes énergies cinétiques avec le nombre de Reynolds (Cas 2). $k = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi \langle k \rangle^i}{U_s^2}$, $k_d = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi \langle k_d \rangle^i}{U_s^2}$ et $k_T = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi [\langle k \rangle^i + \langle k_d \rangle^i]}{U_s^2}$.

macroscopique.

$$\nabla_j (\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i) = 0 \quad (4.31)$$

Cela implique,

$$\nabla_j \delta \bar{u}_j = 0 \quad (4.32)$$

En retranchant (2.24) à (1.20), en multipliant ensuite par $\delta \bar{u}_i$ l'expression obtenue et enfin en prenant la moyenne volumique de l'ensemble il en vient,

$$\begin{aligned}
0 = & \underbrace{-\langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\langle \bar{u}_i \rangle^i \delta \bar{u}_j] \rangle^v}_I - \underbrace{\langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\langle \bar{u}_j \rangle^i \delta \bar{u}_i] \rangle^v}_{II} - \underbrace{\langle \delta \bar{u}_i \nabla_i \frac{\delta \bar{P}}{\rho} \rangle^v}_{III} \\
& + \underbrace{\nu \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j^2 \delta \bar{u}_i \rangle^v}_{IV} - \underbrace{\langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j] \rangle^v}_V - \underbrace{\langle \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta R_{ij} \rangle^v}_{VI}
\end{aligned} \quad (4.33)$$

On développe (4.33) comme suit,

$$\begin{aligned}
I &= -\langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i \rangle^v \quad (\nabla_j \delta \bar{u}_j = 0) \\
&= -\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i \\
&= -\langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \langle \bar{u}_i \rangle^i \nabla_j \phi
\end{aligned} \tag{4.34}$$

$$\begin{aligned}
II &= -\langle \langle \bar{u}_j \rangle^i \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^v + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi \quad (\nabla_j (\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i) = 0) \\
&= -\langle \bar{u}_j \rangle^i \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^v + 2 \langle k_d \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi \\
&= -\langle \bar{u}_j \rangle^i \langle \nabla_j k_d \rangle^v + 2 \langle k_d \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi \quad \left(\frac{1}{2} \nabla_j (\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i) = \nabla_j k_d \right) \\
&= -\langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j [\phi \langle k_d \rangle^i] - \frac{\langle \bar{u}_j \rangle^i}{V} \int \frac{\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i}{2} n_j dS + 2 \langle k_d \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi \\
&= -\langle \bar{u}_j \rangle^i \left[\nabla_j [\phi \langle k_d \rangle^i] - 2 \langle k_d \rangle^i \nabla_j \phi + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2V} \int n_j dS \right] \\
&= -\langle \bar{u}_j \rangle^i \left[\nabla_j [\phi \langle k_d \rangle^i] - \nabla_j \phi [2 \langle k_d \rangle^i + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] \right] \quad (\nabla_j \phi = \frac{-1}{V} \int n_j dS) \\
&= -\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k_d \rangle^i] + \nabla_j \phi \langle \bar{u}_j \rangle^i [3 \langle k_d \rangle^i + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}]
\end{aligned} \tag{4.35}$$

$$\begin{aligned}
III &= -\frac{1}{\rho} \langle \nabla_i [\delta \bar{u}_i \delta \bar{P}] - \delta \bar{P} \nabla_i \delta \bar{u}_i \rangle^v \\
&= -\frac{1}{\rho} \langle \nabla_i [\delta \bar{u}_i \delta \bar{P}] \rangle^v \quad (\nabla_j \delta \bar{u}_j = 0) \\
&= -\frac{1}{\rho} [\nabla_i [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{P} \rangle^i] + \frac{1}{V} \int \delta \bar{u}_i \delta \bar{P} n_i dS] \\
&= -\frac{1}{\rho} [\nabla_i [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{P} \rangle^i] - \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \delta \bar{P} n_i dS]
\end{aligned} \tag{4.36}$$

$$\begin{aligned}
IV &= \nu \langle \nabla_j (\delta \bar{u}_i \nabla_j \delta \bar{u}_i) - \nabla_j \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^v \\
&= \nu \langle \nabla_j^2 k_d \rangle^v - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i \quad (\langle \epsilon_d \rangle^i = \nu \langle \nabla_j \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i) \\
&= \nu \nabla_j \langle \nabla_j k_d \rangle^v - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k_d n_j dS \\
&= \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k_d \rangle^i] - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i \\
&+ \frac{\nu}{V} \nabla_j \left[\int \frac{\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i}{2} n_j dS \right] - \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS \\
&= \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k_d \rangle^i] - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i - \nu \nabla_j \left[\nabla_j \phi \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2} \right] - \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS
\end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
V &= -\langle \nabla_j (\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j) - \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^v \\
&= -\nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i - \frac{1}{V} \int \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j n_j dS \\
&= \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] - \nabla_j \phi [\langle \bar{u}_i \rangle^{i2} \langle \bar{u}_j \rangle^i]
\end{aligned} \tag{4.38}$$

$$\begin{aligned}
VI &= -\langle \nabla_j (\delta \bar{u}_i \delta R_{ij}) - \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^v \\
&= \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] - \frac{1}{V} \int \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} n_j dS \\
&= \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] + \langle \bar{u}_i \rangle^i \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j \phi
\end{aligned} \tag{4.39}$$

En rassemblant tous les termes on obtient finalement l'équation gouvernant l'énergie cinétique dispersive $\langle k_d \rangle^i$,

$$\begin{aligned}
0 &= -\underbrace{\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k_d \rangle^i]}_I - \underbrace{\frac{1}{\rho} \nabla_i [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{P} \rangle^i] - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i]}_{II} \\
&+ \underbrace{\nu \nabla_j^2 [\phi \langle k_d \rangle^i]}_{III} - \underbrace{\phi \langle \epsilon_d \rangle^i}_{IV} - \underbrace{\langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i]}_V + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_i dS \\
&- \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS + \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi \left[3 \langle k_d \rangle^i - \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2} \right] \\
&- \nu \nabla_j \left[\nabla_j \phi \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2} \right] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i + \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \\
&- \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] + [\langle R_{ij} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] \langle \bar{u}_i \rangle^i \nabla_j \phi
\end{aligned} \tag{4.40}$$

On peut reconnaître au second membre respectivement le terme de convection (I), les deux termes de diffusion dispersive (II), la diffusion moléculaire (III), la dissipation (IV) et le terme de production (V) qui sont équivalents à ceux de l'équation (1.22). Les autres termes présents dans l'équation sont issus de l'application de la moyenne volumique et de l'anisotropie du milieu considéré.

4.3.3 Energie cinétique totale

On appelle énergie cinétique totale la somme entre l'énergie cinétique turbulente et l'énergie cinétique dispersive. Cela revient à ne plus distinguer les fluctuations spatiales $\delta \bar{u}_i$ des fluctuations temporelles u'_i à l'échelle macroscopique. L'énergie cinétique totale quantifie ainsi l'énergie de l'ensemble des fluctuations à $\langle \bar{u}_i \rangle^i$.

$$\langle K \rangle^i = \langle k \rangle^i + \langle k_d \rangle^i \quad (4.41)$$

L'équation la gouvernant en régime permanent s'obtient en additionnant (4.29) et (4.40),

$$\begin{aligned} 0 = & \underbrace{-\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle K \rangle^i]}_I + \underbrace{\nu \nabla_j^2 [\phi \langle K \rangle^i]}_{II} - \underbrace{\phi [\langle R_{ij} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i}_{III} \\ & - \underbrace{\nabla_j \left(\phi \left[\frac{\overline{P' u'_j}}{\rho} + \overline{u'_i u'_i u'_j} \right]^i + \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{P} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i \right)}_{IV} \underbrace{- \phi \langle \epsilon \rangle^i - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i}_V \\ & - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_j \delta k \rangle^i] + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k n_j dS + \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi [3 \langle k_d \rangle^i - \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] \\ & + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_i dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS \\ & - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] - \nu \nabla_j [\nabla_j \phi \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \end{aligned} \quad (4.42)$$

On retrouve au second membre respectivement le terme de convection (I), la diffusion moléculaire (II), le terme de production (III), la diffusion dynamique (turbulente et dispersive) (IV) et les termes de destruction (V). Les autres termes présents découlent de l'application de la moyenne volumique et de l'anisotropie du milieu poreux.

4.3.4 Le taux de dissipation turbulente macroscopique

On applique la moyenne volumique à l'équation gouvernant la dissipation à l'échelle du pore afin de dériver son équivalent à l'échelle macroscopique.

$$0 = \langle -\nabla_j(\epsilon \overline{u_j}) + \nabla_j[(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon})\nabla_j\epsilon] - C_1 R_{ij}(\nabla_j \overline{u_i}) \frac{\epsilon}{k} - C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \rangle^v \quad (4.43)$$

On développe chaque terme,

$$\begin{aligned} -\langle \nabla_j(\epsilon \overline{u_j}) \rangle^v &= -\nabla_j(\phi \langle \epsilon \rangle^i \langle \overline{u_j} \rangle^i) - \nabla_j(\phi \langle \delta \epsilon \delta \overline{u_j} \rangle^i) - \underbrace{\frac{1}{V} \int \overline{u_j} \epsilon n_j dS}_0 \\ &= -\nabla_j(\phi \langle \epsilon \rangle^i \langle \overline{u_j} \rangle^i) - \nabla_j(\phi \langle \delta \epsilon \delta \overline{u_j} \rangle^i) \end{aligned} \quad (4.44)$$

$$\begin{aligned} \langle \nabla_j[(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon})\nabla_j\epsilon] \rangle^v &= \nabla_j \langle [(\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon})\nabla_j\epsilon] \rangle^v + \frac{1}{V} \int (\nu + \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon})(\nabla_j\epsilon) n_j dS \\ &= \nu \nabla_j^2(\phi \langle \epsilon \rangle^i) + \nabla_j(\frac{\nu}{V} \int \epsilon n_j dS) + \nabla_j \langle \frac{\nu_t}{\sigma_\epsilon} \nabla_j\epsilon \rangle^v + \frac{1}{V} \int \nu(\nabla_j\epsilon) n_j dS \\ &= \nu \nabla_j^2(\phi \langle \epsilon \rangle^i) + \nabla_j(\frac{\nu}{V} \int \epsilon n_j dS) + \frac{1}{V} \int \nu(\nabla_j\epsilon) n_j dS \\ &\quad + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \nabla_j[\langle \langle \nu_t \rangle^i \nabla_j \langle \epsilon \rangle^i + \langle \nu_t \rangle^i \nabla_j \delta \epsilon + \delta \nu_t \nabla_j \langle \epsilon \rangle^i + \delta \nu_t \nabla_j \delta \epsilon \rangle^v] \\ &= \nu \nabla_j^2(\phi \langle \epsilon \rangle^i) + \nabla_j(\frac{\nu}{V} \int \epsilon n_j dS) + \frac{1}{V} \int \nu(\nabla_j\epsilon) n_j dS \\ &\quad + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \nabla_j[\phi \langle \nu_t \rangle^i \nabla_j \langle \epsilon \rangle^i + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{V} \int \delta \epsilon n_j dS + \phi \langle \delta \nu_t \nabla_j \delta \epsilon \rangle^i] \\ &= \nu \nabla_j^2(\phi \langle \epsilon \rangle^i) + \nabla_j(\frac{\nu}{V} \int \epsilon n_j dS) + \frac{1}{V} \int \nu(\nabla_j\epsilon) n_j dS \\ &\quad + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \nabla_j[\langle \nu_t \rangle^i \nabla_j(\phi \langle \epsilon \rangle^i) + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{V} \int \epsilon n_j dS + \phi \langle \delta \nu_t \nabla_j \delta \epsilon \rangle^i] \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned}
\langle -C_1 R_{ij} (\nabla_j \bar{u}_i) \frac{\epsilon}{k} \rangle^v &= -C_1 \langle \left(\langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i + \delta R_{ij} \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i + \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j \delta \bar{u}_i \right. \\
&\quad \left. + \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \right) \frac{(\langle \epsilon \rangle^i + \delta \epsilon)}{k} \rangle^v \\
&= -\frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle R_{ij} \rangle^i (\nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i + \langle R_{ij} \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i \langle \bar{u}_i \rangle^i \frac{\nabla_j \phi}{\phi} + \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i \right. \\
&\quad \left. + \langle \delta \epsilon \delta R_{ij} \rangle^i \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i + \langle R_{ij} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i \right)
\end{aligned} \tag{4.46}$$

$$\langle -C_2 \frac{\epsilon^2}{k} \rangle^v = -\frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} [\langle \epsilon \rangle^{i2} + \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i] \tag{4.47}$$

En rassemblant les différents termes, on obtient l'équation d'évolution du taux de dissipation turbulente macroscopique,

$$\begin{aligned}
0 &= -\underbrace{\nabla_j (\phi \langle \epsilon \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i)}_I + \underbrace{\nabla_j \left[\left(\nu + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla_j (\phi \langle \epsilon \rangle^i) \right]}_{II} - \underbrace{\frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j (\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i}_{III} \\
&\quad - \underbrace{\frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} - \nabla_j (\phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_j \rangle^i)}_{IV} + \nabla_j \left(\frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_j dS \right) \\
&\quad + \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_j \epsilon) n_j dS + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \nabla_j (\phi \langle \delta \nu_t \nabla_j \delta \epsilon \rangle^i) - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i \right. \\
&\quad \left. + \langle \delta \epsilon \delta R_{ij} \rangle^i \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i + \langle R_{ij} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i \right) - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i
\end{aligned} \tag{4.48}$$

On reconnait et on retrouve au second membre les termes équivalents à l'échelle macroscopique de la convection (I), la diffusion moléculaire et la diffusion turbulente du taux de dissipation (II), le terme de production (III) et le terme de destruction (IV). Les termes restants qui sont des termes surfaciques et des termes contenant des moments d'ordre deux nécessitent une modélisation.

4.3.5 Le taux de dissipation dispersive

Le taux de dissipation dispersive est défini comme suit,

$$\langle \epsilon_d \rangle^i = \nu \left\langle \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \right\rangle^i \quad (4.49)$$

Il est possible de reconstruire cette quantité en appliquant la moyenne volumique sur les données de simulations microscopiques 3D (voir chapitre 2). En comparant cette quantité au taux de dissipation turbulente macroscopique $\langle \epsilon \rangle^i$ (figure 4.3), on en déduit que cette quantité est négligeable en tout point r . Ce faisant, il n'est pas utile de définir une équation d'évolution pour cette quantité. De ce fait, le taux de dissipation total devient $\langle \epsilon_T \rangle^i \approx \langle \epsilon \rangle^i$.

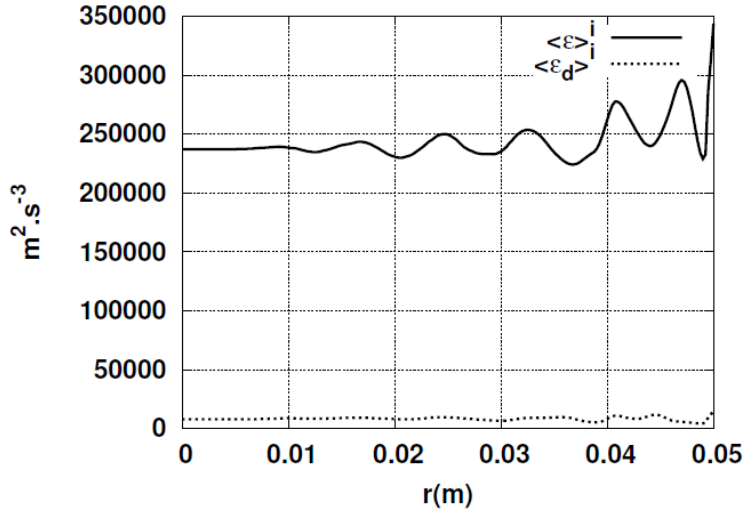


FIGURE 4.3 – Profil radial du taux de dissipation turbulente macroscopique $\langle \epsilon \rangle^i$ et du taux de dissipation dispersive $\langle \epsilon_d \rangle^i$ (Cas 2).

4.3.6 Relations de fermeture

A l'échelle macroscopique seules les quantités superficielles $(\psi)_s = \phi \langle \bar{\psi} \rangle^i$ ont un sens physique. Aussi, les équations macroscopiques seront dérivées

pour des quantités superficielles. Le système que l'on étudie étant considéré axisymétrique, nous nous plaçons dans le repère cylindrique. L'objectif ici est de capturer la dynamique de l'écoulement dans la direction radiale afin de s'en servir pour étudier les transferts thermiques depuis la paroi vers l'intérieur du lit catalytique.

Fermeture des équations de Navier-Stokes macroscopiques

Afin de modéliser les moments d'ordre deux et les termes surfaciques apparaissant dans les équations macroscopiques, nous adoptons la stratégie proposée par Teruel et al.[82] consistant à ne pas faire la distinction entre les corrélations spatiales et temporelles d'ordre deux. Elle doit cependant être adaptée aux écoulements à travers des lits catalytiques confinés dans un tube. Pour ce faire, nous réalisons des simulations RANS 3D à l'intérieur de ces systèmes en imposant des conditions de périodicité dans la direction axiale afin d'éliminer les développements dans cette direction et isoler les développements dans la direction radiale.

A partir de la base de données générée, le profil radial de $\langle u_z \rangle^i$ et $\langle u_r \rangle^i$ peuvent être reconstruits. On montre ainsi que la vitesse moyenne radiale est très proche de zéro (voir la figure 4.4).

$$\langle u_r \rangle^i \approx 0 \quad (4.50)$$

L'équation de continuité à l'échelle macroscopique s'écrit alors,

$$\nabla_z[(u_z)_s] = 0 \quad (4.51)$$

En récrivant (2.24) en coordonnées cylindriques et imposant par le choix d'une condition de périodicité, la nullité des gradients macroscopiques dans la direction axiale ($\frac{\partial \langle \cdot \rangle^i}{\partial z} = 0$) on obtient,

$$\begin{aligned} 0 = & -\frac{\rho}{r} \nabla_r [r \phi \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{u}_z \rangle^i] - \nabla_z [\phi \langle \bar{P} \rangle^i] - \frac{\rho}{r} \nabla_r [r \phi \langle R_{zr} \rangle^i + r \phi \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{u}_z \rangle^i] \\ & + \mu \frac{1}{r} \nabla_r [r \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i)] + \frac{\mu}{V} \int \nabla_i \bar{u}_z n_i dS - \frac{1}{V} \int P n_z dS \end{aligned} \quad (4.52)$$

avec $i = z, r$. En utilisant (4.50) on en déduit, $-\frac{\rho}{r} \nabla_r [r \phi \langle \bar{u}_z \rangle^i \langle \bar{u}_r \rangle^i] = 0$

Le modèle de Teruel et al. est adapté afin que celui-ci puisse reproduire aussi fidèlement que possible le profil radial du tenseur des contraintes turbulentes et dispersives $-\phi(r)[\langle R_{zr} \rangle^i(r) + \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{u}_z \rangle^i(r)]$ obtenu à partir de la

base de données générée par les simulations effectuées à l'échelle microscopique (échelle du pore).

$$-\phi[\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \overline{u_r} \delta \overline{u_z} \rangle^i] = (\nu_T)_s \nabla_r (u_z)_s \quad (4.53)$$

avec,

$$\begin{aligned} (\nu_T)_s = 0.09 \frac{(K)_s^2}{(\epsilon)_s} \times & \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m1}}{\phi} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m2}}{\phi} \right] \end{aligned} \quad (4.54)$$

Sur la figure 4.5, on observe que le modèle dérivé permet de capturer correctement le comportement radial des moments d'ordre deux apparaissant dans (4.52). Ainsi, il est montré que le concept de viscosité turbulente (l'hypothèse de Boussinesq) peut être généralisé en incorporant la dispersion mécanique : le tenseur des contraintes totales (turbulentes et dispersives) est proportionnel au tenseur des déformations.

Cependant, il faut noter qu'une zone proche paroi doit être distinguée de la zone intérieure. En effet, pour la configuration géométrique étudiée (Cas 2), $C_{m1} \neq C_{m2}$ ($C_{m1} = 0.167$ et $C_{m2} = 0.1$). Ces coefficients (< 1) ont pour rôle de limiter la diffusion turbulente et dispersive dans la direction radiale. La zone proche paroi d'une épaisseur égale à un demi-diamètre de particule et dans la quelle la vitesse axiale augmente brutalement jusqu'à la paroi (figure 4.4) semble particulièrement s'opposer à la diffusion turbulente et dispersive. On remarque ainsi que cette zone caractérisée par un fort amortissement de la diffusion radiale est aussi sujette à un effet de canalisation élevé qui a pour tendance à orienter les transferts de quantité de mouvement dans la direction de l'écoulement au détriment des transferts dans les autres directions. La zone intérieure est aussi sujette à des effets de canalisation comme atteste les différents maximums locaux que l'on peut observer sur le profil radial de la vitesse axiale (figure 4.4), mais ces effets sont peu prononcés comparés à la zone proche paroi. Les coefficients C_{m1} et C_{m2} restent cohérents avec ces observations.

En utilisant la même procédure, les termes de surface sont modélisés par

une loi d'Ergun [6] modifiée,

$$\begin{aligned} \frac{\mu}{V} \int \nabla_i \bar{u}_z n_i dS - \frac{1}{V} \int P n_z dS = & - \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F1} \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F2} \right] \times \rho \frac{(1 - \phi)^{0.1}}{d_p \phi^3} (u_z)_s^2 \end{aligned} \quad (4.55)$$

avec $C_{F1} = 0.255$ et $C_{F2} = 0.312$ pour la configuration considérée (Cas 2). On remarque de nouveau que la zone proche paroi se distingue de la zone intérieure par une résistance à l'écoulement moins importante (voir la figure 4.6).

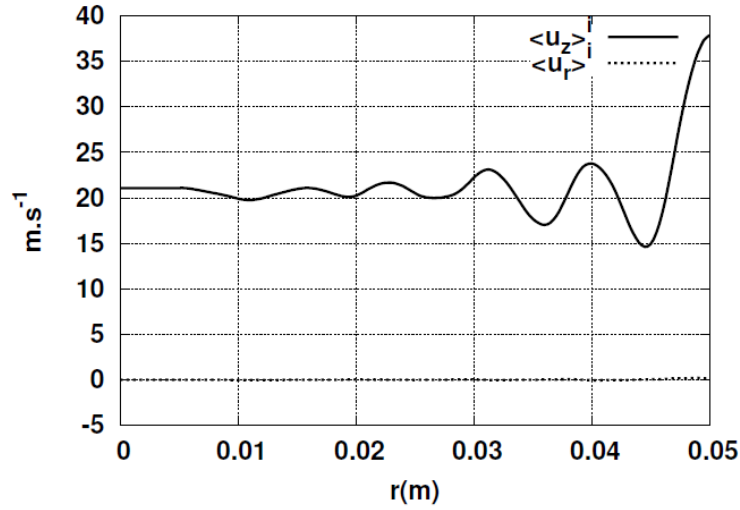


FIGURE 4.4 – Profil radial de la vitesse axiale $\langle \bar{u}_z \rangle^i$ et de la vitesse radiale $\langle \bar{u}_r \rangle^i$ à $Re_p \approx 7800$ (Cas 2).

L'équation de conservation du moment à l'échelle macroscopique s'écrit finalement,

$$0 = -\nabla_z(P)_s + \frac{1}{r} \nabla_r [r \{ \mu + \rho(\nu_T)_s \} \nabla_r (u_z)_s] - h(\phi, d_p) (u_z)_s^2 \quad (4.56)$$

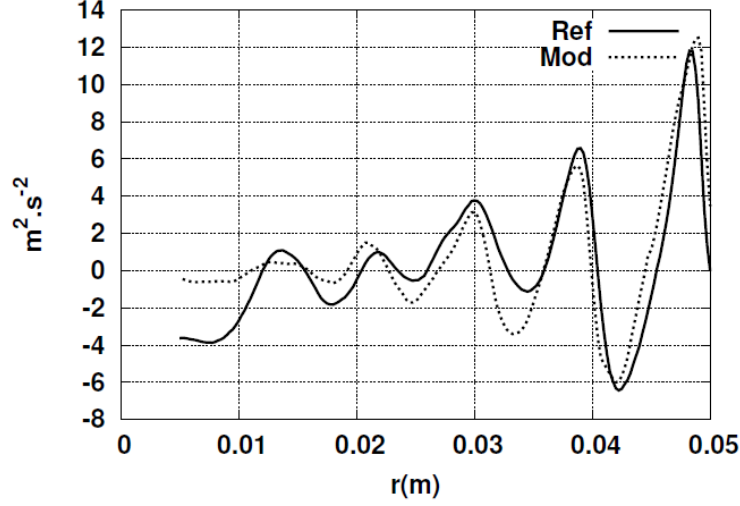


FIGURE 4.5 – Profil radial des termes d’ordre deux se trouvant à gauche de l’égalité dans l’équation (4.53) (Ref) et le modèle de fermeture se trouvant à droite (Mod) pour la configuration Cas 2 à $Re_p \approx 7800$.

avec

$$h(\phi, d_p) = \rho \frac{(1 - \phi)^{0.1}}{d_p \phi^3} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F1} + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F2} \right] \quad (4.57)$$

L’équation (4.56) est très similaire à l’équation de Brinkman modifiée par Vortmeyer et al.[90] en incluant les termes d’inertie,

$$\frac{\partial P}{\partial z} = -f_1 u_z - f_2 u_z^2 + \frac{\mu_{eff}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) \quad (4.58)$$

Des expressions de μ_{eff} ont été formulées par différents auteurs. On peut citer par exemple [91] qui propose l’expression suivante

$$\mu_{eff} = a\mu \exp(bRe_p) \quad (4.59)$$

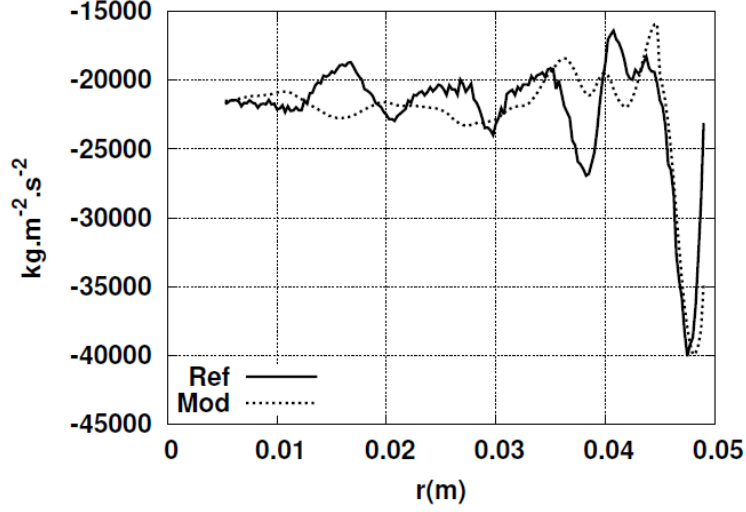


FIGURE 4.6 – Profil radial des termes surfaciques (Ref) et le modèle donné par (4.55) (Mod) pour la configuration Cas 2 à $Re_p \approx 7800$.

avec $a = 2.0$ et $b = 0.0035$ pour des sphères. Giese et al. montrent ainsi que la viscosité effective croît avec le nombre de Reynolds. En prenant différentes valeurs de μ_{eff} , ils montrent aussi qu'en diminuant la valeur de la viscosité effective, on peut accentuer le pic de vitesse observé à la paroi sur le profil radial de la vitesse axiale. Ce faisant, ils démontrent le lien existant entre l'amortissement de la viscosité effective radiale et l'accentuation de l'effet de canalisation proche paroi. Bey et al. [11] assumant ce lien, propose la corrélation suivante qui lui permet de retrouver le maximum de la vitesse, mesuré à la paroi,

$$\mu_{eff} = \mu \left[1 + Re_p^n (b_1 + b_2 \frac{d_t}{d_p}) \right] \quad (4.60)$$

avec $n = 2$, $b_1 = 2 \times 10^{-5}$, $b_2 = 7 \times 10^{-6}$ pour des empilements de particules sphériques. D'autres exprimant le profil de la vitesse dans la zone proche paroi comme une fonction de la viscosité effective [92] proposent pour les empilements de sphères une corrélation du profil radial de cette viscosité

dans la zone proche paroi (épaisseur $5d_p$) qui s'écrit,

$$\mu_{eff} = \mu Re_p [E(\frac{d_t}{d_p}) \exp(r^* F(\frac{d_t}{d_p}))] \times [\cos(\omega r^*) + G] \quad (4.61)$$

avec,

$$E(\frac{d_t}{d_p}) = 3.419 - 0.148 \frac{d_t}{d_p} + 0.011 (\frac{d_t}{d_p})^2 \quad (4.62)$$

$$F(\frac{d_t}{d_p}) = -0.668 + 0.048 \frac{d_t}{d_p} + 0.004 (\frac{d_t}{d_p})^2 \quad (4.63)$$

$G = 0.45$, $\omega = 2.055\pi$ et $r^* = (R - r)/d_p$.

La différence majeure entre ces études et celle menée ici se porte sur la dérivation de la viscosité effective. En effet, cette viscosité est ici dérivée à partir des équations fondamentales gouvernant la dynamique de l'ensemble des fluctuations (turbulentes et dispersives) de l'écoulement permettant d'une part de mettre en lumière les différentes contributions physiques et d'autre part de s'affranchir en partie du caractère empirique et arbitraire des modèles existants. De plus, le modèle proposé est un modèle local qui permet d'évaluer l'intensité du transfert des moments à chaque position radiale à partir de la dynamique locale. Le modèle est de plus cohérent avec les tendances prédites par les différents modèles empiriques. En effet, la viscosité effective proposée dans cette étude, étant reliée directement aux quantités turbulentes, croît par exemple avec le nombre de Reynolds comme souligné par les modèles empiriques cités ci-dessus.

Fermeture de l'équation de l'énergie cinétique totale

En prenant en considération que $\langle u_r \rangle^i \approx 0$ et $\langle \epsilon_d \rangle^i \approx 0$, l'équation (4.42) se réécrit en coordonnées cylindriques sans les termes de développement dans

la direction axiale ($\frac{\partial \langle \cdot \rangle^i}{\partial z} = 0$) sous la forme,

$$\begin{aligned}
0 = & \frac{1}{r} \nabla_r (r \nu \nabla_r [\phi \langle K \rangle^i]) - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r \langle \bar{u}_z \rangle^i \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r \left(r \phi \left[\langle \frac{\bar{P}' u_r'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_r'} \rangle^i - \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{P} \rangle^i - \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i \right] \right) - \phi \langle \epsilon \rangle^i \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \bar{u}_r \delta k \rangle^i] + \frac{\nu}{V} \int \nabla_i k n_i dS \\
& + \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_z dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_z \rangle^i}{V} \int \nabla_i \delta \bar{u}_z n_i dS \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ir} \rangle^i] - \nu \frac{1}{r} \nabla_r [r \nabla_r \phi \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^{i2}}{2}] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i
\end{aligned} \tag{4.64}$$

avec $i, j = z, r, \theta$.

le terme de production est réécrit suivant,

$$\begin{aligned}
& - \phi [\langle R_{ir} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r \langle \bar{u}_i \rangle^i = - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \\
& - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] - \frac{\nabla_r \phi}{\phi} \langle \bar{u}_z \rangle^i \right] \\
& = (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right]^2 + (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r (u_z)_s - \frac{\nabla_r \phi}{\phi^2} (u_z)_s \right]
\end{aligned} \tag{4.65}$$

En regroupant les différents termes de flux on obtient,

$$\begin{aligned}
& - \left(\phi \left[\langle \frac{\bar{P}' u_r'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_r'} \rangle^i - \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{P} \rangle^i - \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta k \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ir} \rangle^i \right] \right. \\
& \left. + \nu \nabla_r \phi \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^{i2}}{2} \right) = \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_K} \left[\nabla_r (K)_s \right]
\end{aligned} \tag{4.66}$$

avec σ_K le nombre de Prandtl turbulent macroscopique à déterminer.

Les termes restants sont regroupés sous forme de production effective.

$$\begin{aligned}
& \frac{\nu}{V} \int \nabla_i k n_i dS + \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_z dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_z \rangle^i}{V} \int \nabla_i \delta \bar{u}_z n_i dS + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \\
& + (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r (u_z)_s - \frac{\nabla_r \phi}{\phi^2} (u_z)_s \right] = f(\phi) (u_z)_s^3
\end{aligned} \tag{4.67}$$

avec $f(\phi)$ une fonction de la porosité à déterminer. L'équation macroscopique de l'énergie cinétique totale s'écrit finalement comme suit sous sa forme superficielle,

$$0 = \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_K} \right) \nabla_r (K)_s \right] + (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right]^2 + f(\phi) (u_z)_s^3 - (\epsilon)_s \quad (4.68)$$

Fermeture de l'équation du taux de dissipation macroscopique

On suit la même procédure que celle utilisée pour dériver l'équation macroscopique de l'énergie cinétique totale. Le terme de convection et les termes de développement dans la direction axiale s'évanouissent et l'équation (4.48) s'écrit alors en coordonnées cylindriques,

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla_r (\phi \langle \epsilon \rangle^i) \right] - \frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{zr} \rangle^i \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i - \frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} \\ & - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_r \rangle^i] + \frac{1}{r} \nabla_r \left(r \frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_r dS \right) + \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_i \epsilon) n_i dS \\ & + \frac{1}{r \sigma_\epsilon} \nabla_r [r \phi \langle \delta \nu_t \nabla_r \delta \epsilon \rangle^i] - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i + \langle \delta \epsilon \delta R_{zr} \rangle^i \nabla_r \langle \bar{u}_z \rangle^i \right. \\ & \left. + \langle R_{ij} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i + \nabla_i \delta \bar{u}_j) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \right) - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i \end{aligned} \quad (4.69)$$

avec $i, j = z, r, \theta$. On réécrit le terme de production comme suit,

$$\begin{aligned} & - \frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{zr} \rangle^i \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i \approx - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i \\ & + \phi \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i \end{aligned} \quad (4.70)$$

On regroupe ensuite les termes de flux,

$$\begin{aligned} & \left(\frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \nabla_r (\phi \langle \epsilon \rangle^i) - \phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_r \rangle^i + \frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_r dS \right. \\ & \left. + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \phi \langle \delta \nu_t \nabla_r \delta \epsilon \rangle^i \right) = \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_{\epsilon K}} \left[\nabla_r (\epsilon)_s \right] \end{aligned} \quad (4.71)$$

avec $\sigma_{\epsilon K}$ le nombre de Prandlt associé au taux de dissipation macroscopique. Le terme de destruction devient,

$$-\frac{C_2\phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i \approx -C_{\epsilon 2} \frac{(\epsilon)_s^2}{(K)_s} \quad (4.72)$$

Les termes restants sont finalement regroupés en tant que production effective additionnelle,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_i \epsilon) n_i dS - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i + \langle \delta \epsilon \delta R_{ir} \rangle^i \nabla_r \langle \bar{u}_i \rangle^i \right. \\ & + \langle R_{jr} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i + \nabla_i \delta \bar{u}_j) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \Big) \\ & + \phi \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i = g(\phi, d_p) (u_z)_s^4 \end{aligned} \quad (4.73)$$

avec $g(\phi, d_p)$, une fonction de la porosité et du diamètre équivalent des particules à déterminer.

L'équation macroscopique du taux de dissipation s'écrit alors sous la forme superficielle,

$$\begin{aligned} 0 = & \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_{\epsilon K}} \right) \nabla_r (\epsilon)_s \right] + C_{\epsilon 1} \frac{(\epsilon)_s}{(K)_s} (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right]^2 \\ & + g(\phi, d_p) (u_z)_s^4 - C_{\epsilon 2} \frac{(\epsilon)_s^2}{(K)_s} \end{aligned} \quad (4.74)$$

avec $C_{\epsilon 1}$ et $C_{\epsilon 2}$ des coefficients du modèle à déterminer.

4.4 Validation du modèle macroscopique

Dans la suite, les quantités obtenues en résolvant le modèle macroscopique auront un astérisque $(\psi)_s^*$, ce qui les distinguera des quantités macroscopiques obtenues en appliquant la moyenne volumique sur les données de simulations réalisées à l'échelle du pore (échelle microscopique).

4.4.1 Modèle macroscopique

Les équations axisymétriques résolues à l'échelle macroscopiques sont rappelées ci-dessous,

$$\rho \nabla_z [(u_z)_s^*] = 0 \quad (4.75)$$

$$0 = -\nabla_z(P)_s^* + \frac{1}{r}\nabla_r[r\{\mu + \rho(\nu_T)_s^*\}\nabla_r(u_z)_s^*] - h(\phi^*, d_p)(u_z)_s^{*2} \quad (4.76)$$

avec,

$$\begin{aligned} (\nu_T)_s^* &= 0.09 \frac{(K)_s^{*2}}{(\epsilon)_s^*} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m1}}{\phi^*} \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m2}}{\phi^*} \right] \end{aligned} \quad (4.77)$$

$$0 = \frac{1}{r}\nabla_r[r\rho\left(\nu + \frac{(\nu_T)_s^*}{\sigma_K}\right)\nabla_r(K)_s^*] + \rho(\nu_T)_s^* \left[\nabla_r(u_z)_s^* \right]^2 + f(\phi^*)(u_z)_s^{*3} - \rho(\epsilon)_s^* \quad (4.78)$$

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{1}{r}\nabla_r[r\rho\left(\nu + \frac{(\nu_T)_s^*}{\sigma_{\epsilon K}}\right)\nabla_r(\epsilon)_s^*] + \rho C_{\epsilon 1} \frac{(\epsilon)_s^*}{(K)_s^*} (\nu_T)_s^* \left[\nabla_r(u_z)_s^* \right]^2 \\ &\quad + g(\phi^*, d_p)(u_z)_s^{*4} - \rho C_{\epsilon 2} \frac{(\epsilon)_s^{*2}}{(K)_s^*} \end{aligned} \quad (4.79)$$

Une expression analytique du profil radial de la porosité représentant le système Cas 2 s'écrit (figure 4.7),

$$\phi^*(r^*) = \begin{cases} 1 & \text{si } r^* = 0 \\ 0.465[1 + 1.1 \exp(-48r^{*2})] + 0.16 \exp(-0.2r^{*2}) \times & \\ \sin(2.46\pi r^*) & \text{sinon} \end{cases} \quad (4.80)$$

avec $r^* = (R - r)/d_p$.

Les fonctions et les coefficients du modèle macroscopique sont ensuite ajustés afin d'obtenir une meilleure concordance des profils radiaux obtenus via le modèle macroscopique avec les profils radiaux provenant des données de simulations réalisées à l'échelle du pore et moyennées dans des VEs appropriés. Il en vient,

$$\begin{aligned} h(\phi^*, d_p) &= \rho \frac{(1 - \phi^*)^{0.1}}{d_p \phi^{*5}} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F1}(Re_p) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F2}(Re_p) \right] \end{aligned} \quad (4.81)$$

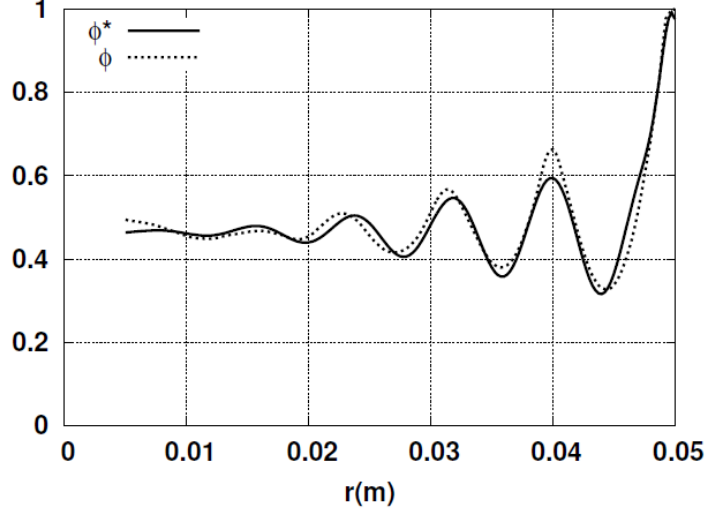


FIGURE 4.7 – Profil de porosité radiale macroscopique (ϕ^*) et microscopique (ϕ) représentatif du système Cas 2.

avec,

$$C_{F1}(Re_p) = \begin{cases} 0.26Re_p^{-0.14} - 0.02 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 0.046 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.82)$$

$$C_{F2}(Re_p) = \begin{cases} 5.5 \times 10^{-6}Re_p + 0.2 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 0.1 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.83)$$

De même,

$$\begin{aligned} f(\phi^*) = & \rho C_{K1}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)}{\phi^{*2}} \times \frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \\ & + \left[\rho C_{K2}(Re_p) \phi^{*5} + \rho C_{K3}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)}{\phi^{*4}} \exp(-4(r - (R - d_p/2))/d_p) \right] \\ & \times \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \end{aligned} \quad (4.84)$$

avec,

$$C_{K1}(Re_p) = \begin{cases} -0.78Re_p^{0.5} + 132 & 4000 \leq Re_p \leq 15600 \\ 38.41 & 15600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.85)$$

$$C_{K2}(Re_p) = \begin{cases} -8 \times 10^{-4}Re_p + 20 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 5.6 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.86)$$

$$C_{K3}(Re_p) = \begin{cases} (5 \times 10^{-6}Re_p)^{-1} + 12 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 23.11 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.87)$$

Et finalement,

$$\begin{aligned} g(\phi^*, d_p) = & \rho C_{E1}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)^{0.5}}{d_p^2 \phi^{*5}} \times \frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \\ & + \rho C_{E2}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)^{0.4}}{d_p^2 \phi^{*8}} \times \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \end{aligned} \quad (4.88)$$

avec,

$$C_{E1}(Re_p) = \begin{cases} -0.049Re_p^{0.26} + 0.66 & 4000 \leq Re_p \leq 15600 \\ 0.069 & 15600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.89)$$

$$C_{E2}(Re_p) = \begin{cases} (0.01Re_p)^{-0.8} & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 0.016 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (4.90)$$

Les différents coefficients du modèle mettent une fois de plus en évidence l'existence d'une zone proche paroi dont la dynamique est différente de la zone intérieure. Notons de plus que les différents coefficients présentés ci-dessus tendent vers des valeurs constantes (figures 4.8 4.9 et 4.10) à haut nombre de Reynolds. Cela montre que l'intensité des mécanismes générant la trainée et les productions sous-filtre se stabilisent. En effet, le développement des structures turbulentes avec le nombre de Reynolds est limité par la taille des pores, les contraignant à se stabiliser. Seule l'intensité de ses structures (proportionnelle à $(u_z)_s^2$, $(u_z)_s^3$ ou $(u_z)_s^4$) augmente avec le nombre de Reynolds. Les autres coefficients du modèle macroscopique sont constants, $C_{m1} = 0.444$, $C_{m2} = 0.05$, $\sigma_K = 1$, $\sigma_{\epsilon K} = 1.3$, $C_{\epsilon 1} = 1.44$, $C_{\epsilon 2} = 1.92$. On remarque que

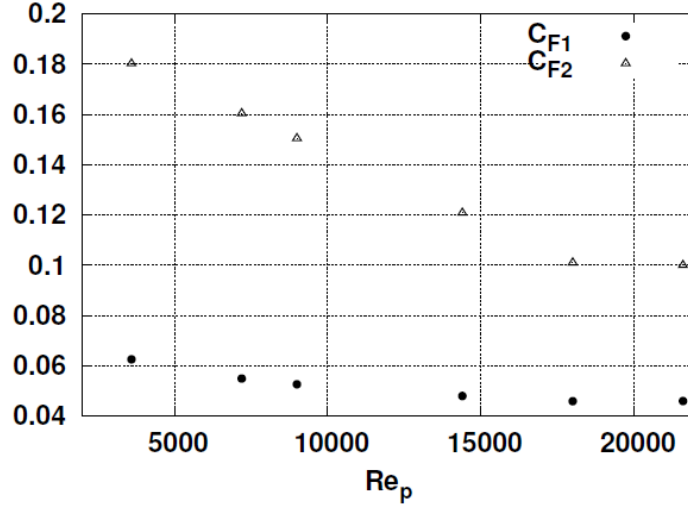


FIGURE 4.8 – Variation de C_{F1} et C_{F2} en fonction du nombre de Reynolds.

C_{m1} et C_{m2} prennent des valeurs différentes de celles estimées par comparaison aux données de simulations effectuées à l'échelle du pore. Ceci met en lumière l'influence des effets 3D négligés par le modèle. En effet, nous avons par exemple négligé l'influence de la direction angulaire sur l'écoulement. Or comme le montre la figure 4.11, la diffusion dispersive dans la direction angulaire est du même ordre de grandeur que la diffusion dispersive dans la direction radiale. Les effets 3D semblent soutenir l'amortissement de la diffusion radiale dans la zone proche paroi alors qu'ils contribuent à atténuer cet amortissement dans la zone intérieure. De plus, les coefficients C_{m1} et C_{m2} sont indépendants du nombre de Reynolds, ce qui montre que l'amortissement de la diffusion radiale évolue proportionnellement à l'accroissement de la diffusion avec le nombre de Reynolds.

4.4.2 Validation

La table 4.1 montre que la perte de charge est correctement estimée par le modèle macroscopique. L'estimation est d'autant meilleure que le nombre de Reynolds est élevé. En effet, les termes surfaciques ont été modélisés par

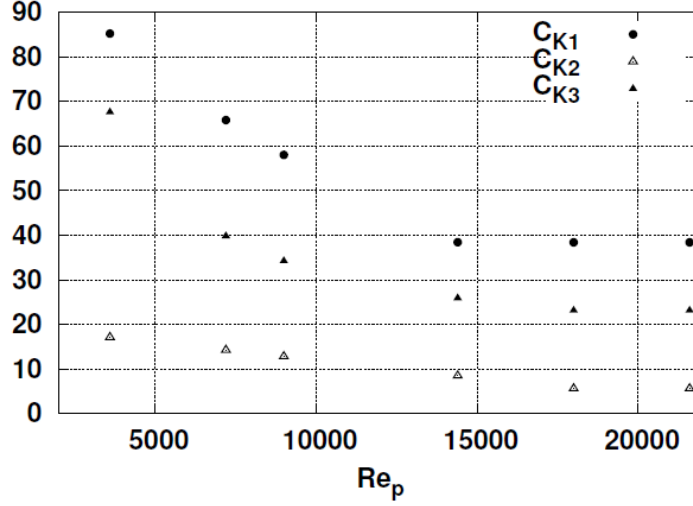


FIGURE 4.9 – Variation de C_{K1} , C_{K2} et C_{K3} en fonction du nombre de Reynolds.

un terme de Forchheimer ($\sim u_z^2$) dont la validité est d'autant meilleure que le régime est inertiel.

L'équation BDF (Brinkman-Darcy-Forchheimer) dérivée ici (4.56) permet de retrouver correctement le profil radial de la vitesse moyenne obtenu à partir de simulations réalisées à l'échelle du pore (voir figure 4.12). Le pic du maximum de la vitesse observé à la paroi est le fruit d'une part de l'empilement particulier proche paroi caractérisé par une porosité tendant vers 1 avec vigueur (figure 4.7), ce qui réduit la résistance à l'écoulement et d'autre part de l'effet de canalisation proche paroi limitant significativement les effets diffusifs. Cette résistance à la diffusion est prise en compte dans le modèle par les coefficients C_{m1} et C_{m2} . La région intérieure est aussi affectée par l'effet de canalisation qui est certes moins violent que celui observé dans la région proche paroi, mais assez important pour être visualisé à l'échelle d'observation. On observe de plus que le profil de la vitesse suit rigoureusement le profil de la porosité : la physique nouvelle apparaissant à l'échelle macroscopique (l'effet de canalisation et la résistance à la diffusion radiale) est une conséquence directe de l'influence de la configuration géométrique de

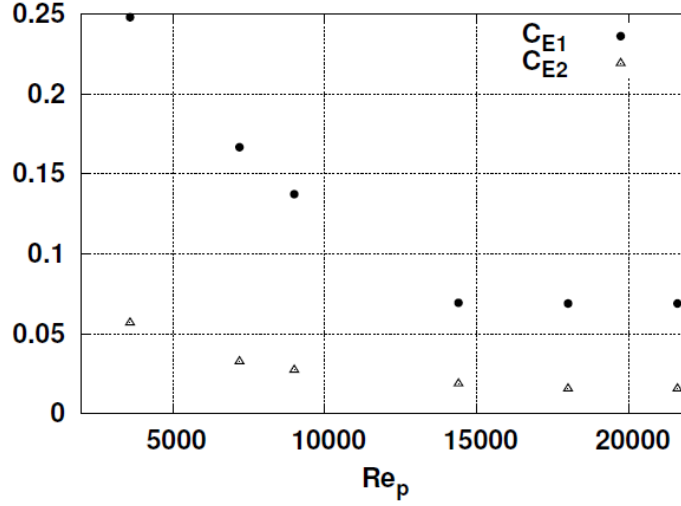


FIGURE 4.10 – Variation de C_{E1} et C_{E2} en fonction du nombre de Reynolds.

la matrice poreuse sur la dynamique de l'écoulement.

L'énergie cinétique totale et le taux de dissipation sont aussi évalués avec satisfaction par le modèle macroscopique (voir figures 4.13 et 4.14). L'impact des effets de canalisation est visible sur le profil radial des quantités turbulentes. Pour correctement modéliser l'atténuation des flux diffusifs dans la région intérieure, il faut modifier les nombres de Prandtl associés à l'énergie cinétique turbulente et au taux de dissipation, σ_K et $\sigma_{\epsilon K}$. Ces coefficients (notamment $\sigma_{\epsilon K}$ (figure 4.14)) sont des fonctions de Re_p . Pour ne pas alourdir le modèle, les valeurs du modèle $k - \epsilon$ standard sont conservées.

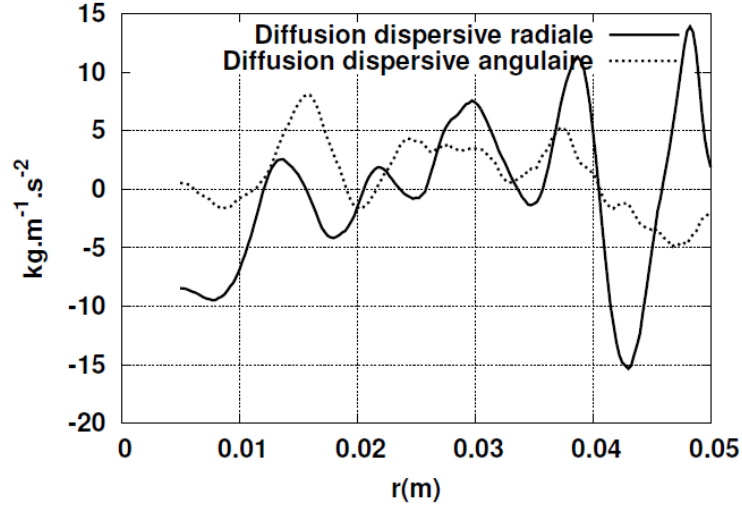
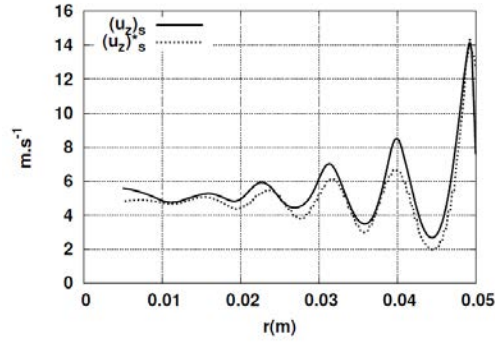


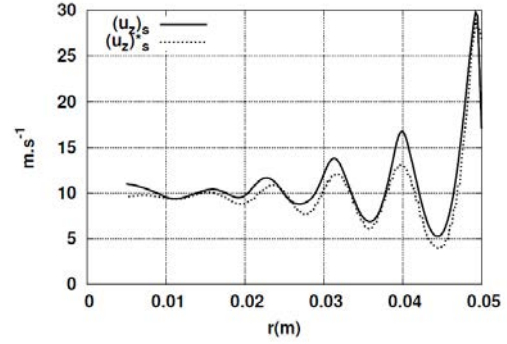
FIGURE 4.11 – Profil radial de la diffusion dispersive radiale $(-\rho\langle\delta\bar{u}_z\delta\bar{u}_r\rangle^i)$ et de la diffusion dispersive angulaire $(-\rho\langle\delta\bar{u}_z\delta\bar{u}_\theta\rangle^i)$.

Re_p	$\Delta P/\Delta L(Pascal/m)$	$(\Delta P)^*/\Delta L(Pascal/m)$	Erreur
2 000	-2272.8	-2148.9	5.45 %
4 000	-7841.1	-7582.1	3.30 %
7 800	-26668.3	-26829.5	0.6 %
15 600	-89880.4	-91042.5	1.3 %
19 500	-133767.5	-130105.8	2.7%
23 300	-185831.1	-186726.7	0.5 %

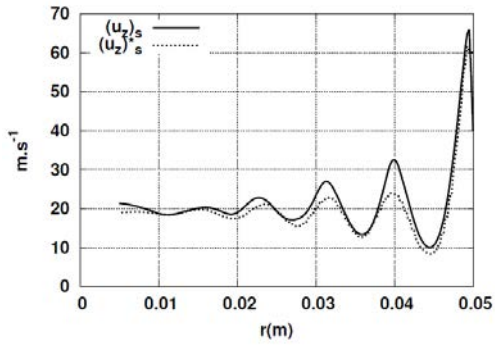
TABLE 4.1 – Évaluation de la perte de charge. Micro($\Delta P/\Delta L$) vs Macro $((\Delta P)^*/\Delta L)$



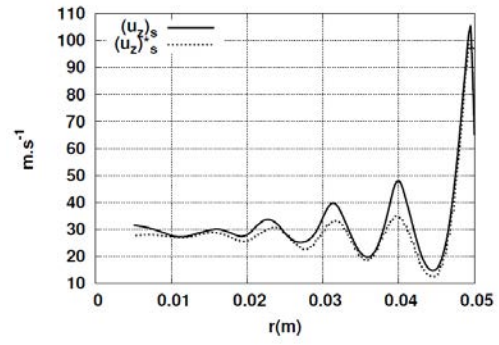
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

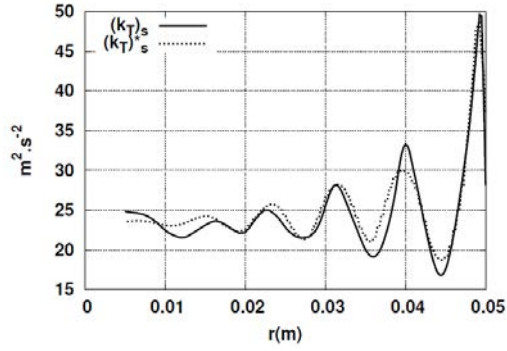


(c) $Re_p = 15600$

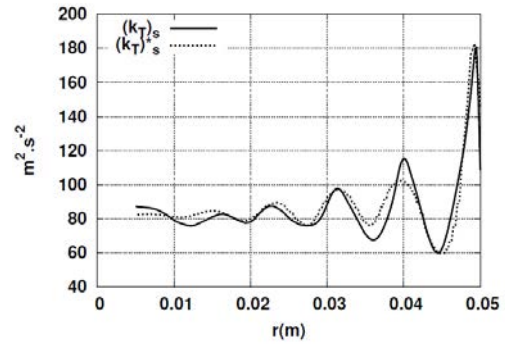


(d) $Re_p = 23300$

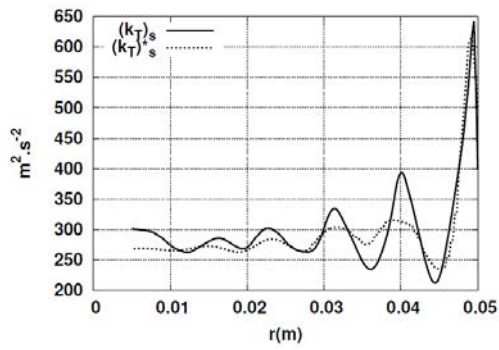
FIGURE 4.12 – Profil radial de la vitesse moyenne en $m \cdot s^{-1}$, Micro $(u_z)_s$ vs Macro $(u_z)_s^*$.



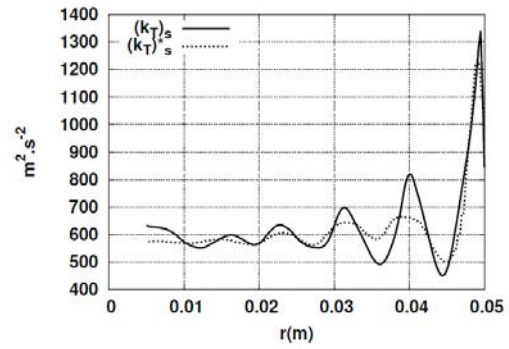
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

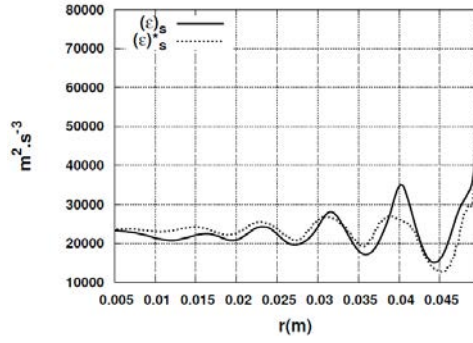


(c) $Re_p = 15600$

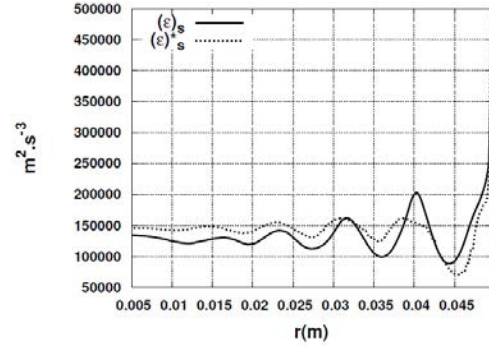


(d) $Re_p = 23300$

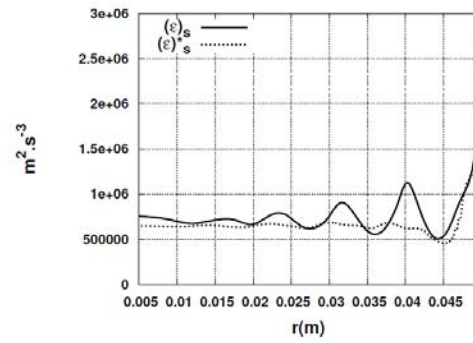
FIGURE 4.13 – Profil radial de l'énergie cinétique totale en $m^2 \cdot s^{-2}$, Micro $(k)_s$ vs Macro $(k)_s^*$.



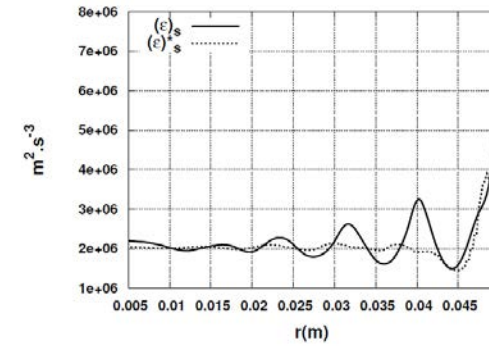
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$



(c) $Re_p = 15600$



(d) $Re_p = 23300$

FIGURE 4.14 – Profil radial du taux de dissipation en $m^2 \cdot s^{-3}$, Micro $(\epsilon)_s$ vs Macro $(\epsilon)_s^*$.

4.5 Conclusion

Le modèle macroscopique décrivant la dynamique radiale d'un écoulement turbulent dans des lits catalytiques confinés est validé sur les données de simulations 3D réalisées à l'échelle du pore. La perte de charge est correctement évaluée tout comme le profil radial de la vitesse moyenne. Le pic du maximum de la vitesse à la paroi est également capturé avec succès. L'énergie cinétique turbulente et le taux de dissipation à l'échelle macroscopique sont aussi estimés avec précision.

Le modèle macroscopique incorpore des effets physiques particuliers qui sont propres à l'influence de la configuration géométrique de la matrice poreuse sur l'écoulement. En effet, le mécanisme de la dispersion mécanique est amplifié par le caractère aléatoire de l'empilement des particules améliorant ainsi les flux diffusifs. Cependant, la réorganisation des particules solides imposée par la présence de la paroi donne lieu à des effets de canalisation limitant la diffusion dans la direction radiale. Pour les rapports d_t/d_p que nous considérons, l'influence de la paroi est loin d'être négligeable et l'intensité des mécanismes de diffusion peut être évaluée comme étant le fruit de la compétition entre des mécanismes favorables (dispersion, turbulence) et des mécanismes défavorables (canalisation) au processus de diffusion. Lorsque l'influence de la paroi est importante, l'effet de canalisation finit par l'emporter sur la dispersion ($k_T < 1$) ce qui est un inconvénient pour le transport de scalaire (figure 4.15). Cependant, par le choix de la forme et de la taille des particules solides, il est possible de conserver des mécanismes de diffusion importants (figure 4.15).

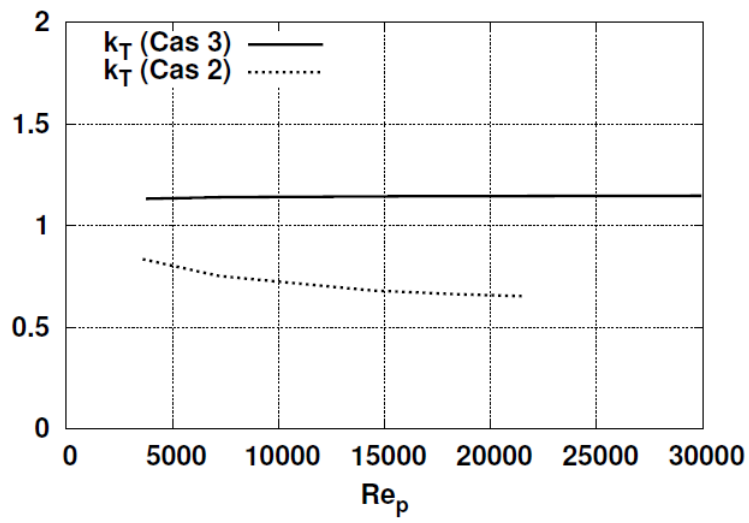


FIGURE 4.15 – Évolution de l'énergie cinétique totale $k_T = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi[\langle k \rangle^i + \langle k_d \rangle^i]}{U_s^2}$ avec le nombre de Reynolds pour différentes configurations de la matrice poreuse (Cas 2 et Cas 3).

Chapitre 5

Modèle macroscopique du transport de chaleur dans les lits catalytiques

Sommaire

5.1	Introduction	162
5.2	Étude bibliographique	164
5.2.1	Modèles à deux zones	164
5.2.2	Modèles basés sur la dynamique de l'écoulement .	165
5.3	Modèle macroscopique de la diffusion thermique	167
5.3.1	État de l'art	167
5.3.2	Région intérieure : $r < R - d_p/2$	171
5.3.3	Région proche paroi : $R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10$.	172
5.3.4	Raccord à la paroi : $R - d_p/10 \leq r < R$	173
5.4	Validation du modèle macroscopique	178
5.4.1	Le modèle macroscopique	178
5.4.2	Validation du modèle macroscopique	178
5.5	Conclusion	185

5.1 Introduction

Modéliser correctement le transport radial de la chaleur à l'intérieur des tubes catalytiques est un enjeu majeur dans l'industrie du SMR (Steam Me-

thane Remorming). En effet, une différence de température de $20K$ sur la paroi du tube, qui dans les conditions opératoires est à une température d'environ $1000K$, réduit sa durée de vie de 10 à moins de 5 ans. La production doit être arrêtée et le coût du retubage peut avoisiner les 5 – 8 millions de dollars.

Or on observe dans ces types de système des gradients de température très importants dans la direction radiale, notamment en zone proche paroi. De plus, cette zone qui contient l'essentiel de la résistance thermique est peu accessible aux techniques expérimentales (mesure de la température proche paroi par un thermocouple). Il est ainsi difficile de prédire correctement les transferts thermiques dans cette zone. Des modèles simplifiés, tels que les modèles à deux coefficients $\lambda_r - h_w$ reposant sur une stratégie qui consiste à coller la majeure partie de la résistance thermique sur la paroi et à garder une température relativement plate dans la région intérieure (voir Chapitre 3), ont été développés durant ces dernières décennies. Cependant, le manque de concordance entre les différentes corrélations dérivées pour ces coefficients, notamment pour le coefficient de transfert à la paroi h_w met en exergue les limites de ce type d'approche.

L'introduction récente et l'utilisation croissante de la CFD dans ce domaine de l'industrie a relancé des projets de recherche visant à mieux comprendre la physique des écoulements dans les réacteurs tubulaires afin d'une part améliorer les approches existantes et d'autre part envisager des approches alternatives.

Une approche plus réaliste (et alternative aux modèles à deux coefficients) qui consiste à se dispenser du coefficient de transfert à la paroi h_w au profit d'une conductivité effective dépendant de la position radiale $\lambda_{eff}(r)$ a été proposée par différents auteurs [93, 94, 95, 12, 96]. Nous allons dans ce chapitre adopter cette approche pour capturer le transport de la chaleur dans la direction radiale. Pour ce faire, nous utiliserons pleinement les résultats obtenus au chapitre précédent. En effet, la majeure partie de la chaleur étant transportée par la dynamique de l'écoulement, le comportement local de l'écoulement ainsi que l'intensité locale des mélanges turbulents et dispersifs jouent un rôle primordial sur l'efficacité de la conductivité thermique effective locale à chaque position radiale.

5.2 Étude bibliographique

5.2.1 Modèles à deux zones

Bunnell et al, [97] sont parmi les premiers à obtenir une conductivité effective dépendant de la position radiale. En partant de l'équation différentielle de la conservation de l'énergie, ils estiment les gradients de température en mesurant la pente des profils de température obtenus à l'aide de thermocouples et ce faisant évaluent la conductivité radiale effective. Ils observent qu'elle dépend peu de la position radiale dans la région intérieure mais chute brutalement dans la zone proche paroi [98].

C'est à partir des années 80 que ce type d'approches connaît un regain d'intérêt. Une des approches fut de postuler directement une dépendance radiale de la conductivité effective. Ahmed et al. [99] proposent par exemple une dépendance radiale à l'aide d'un polynôme de degrés trois depuis le centre jusqu'à une distance r_m où le maximum est atteint puis une décroissance linéaire jusqu'à la paroi. L'épaisseur de la zone proche paroi est prise égale à $2d_p$.

D'autres modèles avec des formes postulées sont développés en conservant toutefois l'idée qu'il faut séparer la zone proche paroi de la zone intérieure. Cependant, l'épaisseur de la zone proche paroi est différente selon les auteurs. Gunn et al. [100, 101, 102] par exemple proposent une épaisseur de la zone proche paroi égale à $0.25 - 0.3d_p$ qui correspond à une zone dans laquelle la porosité augmente avec une pente très raide. Dans cette zone, un profil de température avec une dépendance quadratique de la position radiale est postulé alors que la zone intérieure est caractérisée par une conductivité effective constante. Smirnov et al. [103] introduisent une épaisseur qui est une fonction de la porosité moyenne ϕ_0 , caractérisant une zone de faible mélange, et proposent une décroissance de la conductivité effective linéaire dans cette zone alors que celle-ci garde une valeur constante dans la région intérieure. Le coefficient de transfert à la paroi est toutefois conservé.

L'influence de la structure de la géométrie de l'empilement et de la dynamique de l'écoulement a été étudiée par Borkink et al. [104] dans les modèles à deux zones. Définissant l'épaisseur de la zone proche paroi comme un paramètre dépendant du nombre de Reynolds et du rapport entre le diamètre du tube et le diamètre des sphères, des valeurs différentes pour la porosité et la vitesse sont associées à chaque zone. Il fut remarqué que dans la zone proche paroi caractérisée par une porosité et une vitesse plus impor-

tante, la conductivité effective avait une valeur plus petite montrant ainsi l'influence particulière de la structure de l'empilement et de la dynamique de l'écoulement sur le transport de la chaleur.

5.2.2 Modèles basés sur la dynamique de l'écoulement

Cheng et al. [105] propose une loi de paroi qui permet de prendre en compte l'effet de canalisation proche paroi accentuant la résistance thermique. La conductivité thermique effective dans un empilement de sphères confiné entre deux plaques est exprimée suivant,

$$\lambda(y) = \lambda_f D_T Pr \cdot Re_p \cdot u(y) \cdot l(y) \quad (5.1)$$

avec λ_f la conductivité thermique du fluide, Pr le nombre de Prandtl, Re_p le nombre de Reynolds, $D_T = 0.25$ une constante empirique, $u(y)$ la vitesse de l'écoulement adimensionnée et $l(y)$ une fonction de paroi dépendant de la distance à la paroi. L'expression de $u(y)$ est déterminée en utilisant la méthode de développement asymptotique raccordé. En effet, le système d'équations de Brinkman adimensionné suivant est considéré,

$$\frac{\partial u}{\partial x} = 0 \quad v = 0 \quad (5.2)$$

$$\frac{u}{K} = \sigma^2 \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \alpha \quad (5.3)$$

avec

$$\sigma = \sqrt{\frac{d_p^2 \phi_0}{A(1 - \phi_0^2)H^2}} \quad (5.4)$$

$$\alpha = -\frac{1}{\mu u_m} \sqrt{\frac{d_p^2 \phi_0}{A(1 - \phi_0^2)H^2}} \frac{dP}{dx} \quad (5.5)$$

$$u_m = \frac{1}{H} \int_0^H u dy \quad (5.6)$$

où ϕ_0 est la porosité moyenne, H la demi-épaisseur et A une constante. La perméabilité K est exprimée avec une forme de type exponentielle,

$$K = 1 + C_2 \exp(-N_2 y / \gamma) \quad (5.7)$$

avec $\gamma = d_p/H$. En considérant,

$$\sigma \ll \gamma \ll 1 \quad (5.8)$$

le système ci-dessus est résolu dans la région externe avec les variables $Y = y/\gamma$ et $U = u$ et dans la région interne avec les variables $\hat{Y} = y/\sigma$ et $\hat{U} = u$. La variable vitesse est ensuite développée en fonction du petit paramètre $\epsilon = \sigma/\gamma$.

$$\begin{aligned} U(y) &= U_0(Y) + \epsilon U_1(Y) + O(\epsilon^2) \\ \hat{U}(y) &= \hat{U}_0(\hat{Y}) + \epsilon \hat{U}_1(\hat{Y}) + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.9)$$

Les problèmes d'ordre zéro et d'ordre 1 sont résolus dans les deux régions et la solution raccordée obtenue s'écrit,

$$\begin{aligned} u(y) = & \alpha \left\{ 1 + C_2 \exp \left(-N_2 \frac{y}{\gamma} \right) - (1 + C_2) \times \exp \left[-\frac{y}{\sigma} \sqrt{1 + C_2} \right] \right. \\ & \left. + \frac{C_2 N_2}{4\gamma} y \times \left[1 + \frac{y}{\sigma \sqrt{1 + C_2}} \right] \times \exp \left[-\frac{y}{\sigma \sqrt{1 + C_2}} \right] \right\} + O(\epsilon^2) \end{aligned} \quad (5.10)$$

La loi de paroi postulée $l(y)$ s'écrit quant à elle,

$$l(y) = \begin{cases} \left(\frac{y}{\beta d_p} \right)^n & 0 \leq y \leq \beta d_p \\ 1 & y \geq \beta d_p \end{cases}$$

où $\beta = 2.5$ et $n = 1$ sont identifiés sur des données expérimentales.

D'autres tentatives consistant à inclure une vitesse calculée à partir du modèle de Brinkman-Darcy-Forchheimer (BDF) (4.58) [90] et une porosité dépendant de la position radiale dans l'équation de transport de la chaleur,

$$\rho C_p u_z(r) \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \lambda(r, \phi(r)) \frac{\partial T}{\partial z} \right] \quad (5.11)$$

ont vu le jour [106, 107] montrant de notables améliorations sur l'estimation des profils de température [108, 93]. Par exemple, Winterberg et al. [94] introduit dans l'équation (5.11) une porosité ayant une forme de type exponentielle et une vitesse calculée en résolvant l'équation (4.58) avec la forme de viscosité effective (4.59) proposée par Giese et al. [91]. La forme de la conductivité effective postulée de [105] est utilisée et les différents coefficients du modèle

décrivant cette conductivité effective sont des paramètres optimisés sur des données expérimentales.

$$\lambda(r, \phi(r)) = \lambda_{bed} + K_{1,h} Pr Re_p \frac{u_c}{u_m} f(R - r) \lambda_f \quad (5.12)$$

avec λ_f la conductivité du fluide, λ_{bed} la conductivité effective sans écoulement, R le rayon du tube, u_c la vitesse au centre, u_m la vitesse moyenne et

$$f(r - R) = \begin{cases} \left(\frac{R-r}{K_{2,h}d_p}\right)^n & 0 \leq R - r \leq K_{2,h}d_p \\ 1 & K_{2,h}d_p \leq R - r \leq R \end{cases}$$

avec $K_{2,h} = 0.44 + 4 \exp(-Re_p/70)$, $K_{1,h} = 1/8$ et $n = 2$.

5.3 Modèle macroscopique de la diffusion thermique

5.3.1 État de l'art

L'équation régissant le transport turbulent de la chaleur par la phase fluide dans des lits catalytiques (Cas 2) s'écrit en coordonnées cylindriques et à l'échelle macroscopique,

$$\begin{aligned} (\rho C_p)_f \phi \langle \bar{u}_z \rangle^i \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{T} \rangle^i = & - (\rho C_p)_f \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \phi \left[\langle \delta u_r \delta T \rangle^i + \langle \bar{u}'_r \bar{T}' \rangle^i + \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i \right] \right] + \\ & \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[(\lambda_f \phi) \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i + \frac{1}{V} \int n_r \lambda_f \delta \bar{T}_f ds \right] \end{aligned} \quad (5.13)$$

Le terme de surface et les moments d'ordre deux nécessitent une modélisation afin de fermer l'équation. Toutefois, le terme de surface appelé aussi tortuosité est négligeable par rapport aux flux thermiques turbulents et dispersifs (figure 5.1).

L'approche de Drouin [109, 110]

L'approche de Drouin consiste à dériver une équation d'évolution pour la fluctuation thermique $\delta \bar{T}$ dans des milieux stratifiés (ordonnés) composés de canaux plans, de tubes circulaires ou de conduites annulaires. Appliquant la

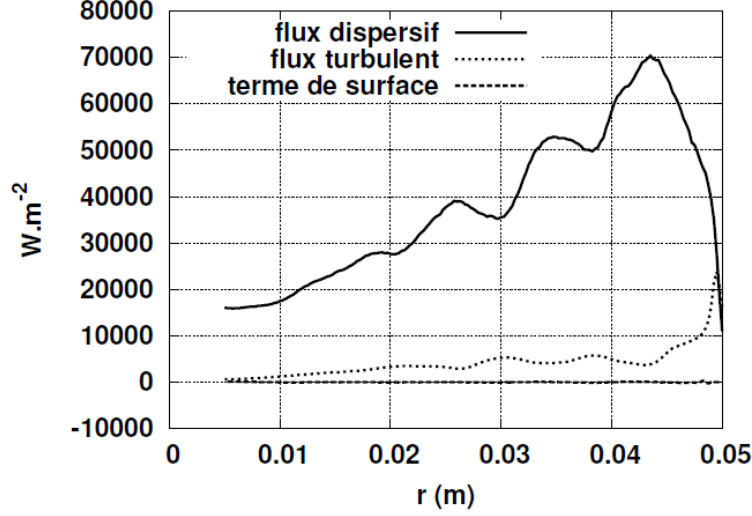


FIGURE 5.1 – Profil radial de la tortuosité ($\frac{1}{V} \int n_r \lambda_f \delta \bar{T}_f ds$), du flux turbulent ($-\phi(\rho C_p)_f \langle \overline{u'_r T'} \rangle^i$) et du flux dispersif ($-\phi(\rho C_p)_f \langle \overline{\delta u_r \delta T} \rangle^i$). $Re_p = 15600$.

moyenne volumique à l'équation de transport local de la température, puis retranchant l'équation macroscopique obtenue à l'équation du transport à l'échelle locale, elle obtient l'équation de transport gouvernant les fluctuations de température.

$$\frac{\partial \bar{T}_f}{\partial t} - \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \delta \bar{T}_f}{\partial t} \quad (5.14)$$

avec,

$$\begin{aligned} \phi \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle_f}{\partial t} = & - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \langle \bar{u}_i \rangle_f \langle \bar{T}_f \rangle_f) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \langle \overline{u'_i T'_f} \rangle_f) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\phi \alpha_f \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle_f}{\partial x_i} \right) \\ & + \phi \langle \alpha_f \frac{\partial \bar{T}_f}{\partial x_i} n_i \delta_w \rangle_f + \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \langle \alpha_f \delta \bar{T}_f n_i \delta_w \rangle_f) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{T}_f \rangle_f) \end{aligned} \quad (5.15)$$

et

$$\begin{aligned} \frac{\partial \delta \bar{T}_f}{\partial t} = & -\frac{\partial}{\partial x_i} (\langle \bar{u}_i \rangle_f \delta \bar{T}_f) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\alpha_f \frac{\partial \delta \bar{T}_f}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\langle \bar{u}'_i T'_f \rangle_f - \overline{u'_i T'_f} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} (\delta \bar{u}_i \delta \bar{T}_f) + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{T}_f \rangle_f - \frac{\partial}{\partial x_i} (\delta \bar{u}_i \langle \bar{T}_f \rangle_f) - \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \alpha_f \delta \bar{T}_f n_i \delta_w \rangle_f \end{aligned} \quad (5.16)$$

En raisonnant sur les ordres de grandeur des termes de l'équation (5.16), la dépendance temporelle et les termes de variation à l'échelle macroscopique ($\frac{\partial}{\partial x_i} \langle \cdot \rangle_f$) peuvent être négligés. L'équation (5.16) devient alors,

$$\bar{u}_i \frac{\partial \delta \bar{T}_f}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\alpha_t + \alpha_f) \frac{\partial \delta \bar{T}_f}{\partial x_i} \right] = \left(\frac{\partial \alpha_t}{\partial x_i} - \delta \bar{u}_i \right) \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle_f}{\partial x_i} \quad (5.17)$$

où le flux turbulent est fermé suivant $-\overline{u'_i T'_f} = \alpha_t \frac{\partial \bar{T}_f}{\partial x_i}$.

En recherchant $\delta \bar{T}_f$ sous la forme,

$$\delta \bar{T}_f = \eta_j \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle_f}{\partial x_i} \quad (5.18)$$

l'équation (5.17) est réécrite dans la phase fluide suivant,

$$\bar{u}_i \frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\alpha_t + \alpha_f) \frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} \right] = \frac{\partial \alpha_t}{\partial x_i} - \delta \bar{u}_j \quad (5.19)$$

avec la condition

$$\frac{\partial \eta_j}{\partial x_i} n_i = -\delta_{ij} n_i \quad (5.20)$$

à l'interface fluide-solide. En injectant (5.18) dans l'équation (5.15), la dispersion thermique $-\langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{T}_f \rangle_f$ peut être formulée comme suit,

$$-\langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{T}_f \rangle_f = D_{ij}^P \frac{\partial \langle \bar{T}_f \rangle_f}{\partial x_i} \quad (5.21)$$

avec $D_{ij}^P = -\langle \delta \bar{u}_i \eta_j \rangle_f$, le tenseur de dispersion.

Dans la cas laminaire ($Re < 1000$), le coefficient de dispersion adimensionné D_{ij}^{P*} peut être obtenu analytiquement en résolvant (5.19) et (5.20). Pour un écoulement dans un tube à section circulaire par exemple $D_{zz}^{P*} = Pe^2/192$ avec Pe le nombre de Peclet.

Dans le cas complètement turbulent ($Re > 6000$), Drouin propose l'expression suivante,

$$D_{zz}^{P*} = C_t^P \sqrt{f_p} Pe + \frac{C_0 + C_1 Pr + C_2 Pr^2}{\sqrt{f_p} Pe} \quad (5.22)$$

avec Pr le nombre de Prandtl moléculaire, f_p le coefficient de frottement et C_t^P , C_0 , C_1 et C_2 des constantes à déterminer sur des simulations de référence.

L'approche de Mathey [89, 111]

Nous avons vu au chapitre 4 que l'hypothèse de Boussinesq est toujours vérifiée à l'échelle macroscopique ce qui permet de montrer que les moments d'ordre deux de l'équation du moment sont proportionnels au gradient de la vitesse (4.53). De même, l'idée ici est de relier la conductivité effective comprenant la conduction turbulente et dispersive au gradient de la température par le biais de la viscosité dynamique de l'écoulement [89, 111],

$$-(\rho C_p)_f \phi [\langle \overline{\delta u_r \delta T} \rangle^i + \langle \overline{u'_r T'} \rangle^i] = \phi (\rho C_p)_f \frac{\langle \nu_T \rangle^i}{\sigma_t} \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i \quad (5.23)$$

avec σ_t le nombre de Prandtl turbulent à l'échelle macroscopique. Adoptant cette approche, Mathey [111] était en mesure de dériver une corrélation, reposant sur des bases théoriques, de la conductivité thermique effective dans les lits catalytiques. En effet, étendant l'idée de Teruel et al. de regrouper les fluctuations temporelles et spatiales au champ de température, la fermeture suivante a été proposée,

$$-(\rho C_p)_f \phi [\langle \overline{\delta u_r \delta T} \rangle^i + \langle \overline{u'_r T'} \rangle^i] = \lambda_{eff} \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i \quad (5.24)$$

avec,

$$\lambda_{eff} = \phi (\rho C_p)_f \frac{\langle \nu_T \rangle^i}{\sigma_t} \quad (5.25)$$

La viscosité dynamique $\langle \nu_T \rangle^i$ est exprimée en fonction de l'énergie cinétique totale et du taux de dissipation proposés par Teruel et al.,

$$\langle \nu_T \rangle^i = C_\mu \frac{k_{Teruel}^2}{\epsilon_{Teruel}} \quad (5.26)$$

En se plaçant dans un régime de turbulence développée isotrope et homogène, les équations (4.2) et (4.3) peuvent être vérifiées. Des corrélations sont ensuite dérivées pour estimer $\langle k \rangle_\infty$ et $\langle \epsilon \rangle_\infty$ [77, 82],

$$\langle k \rangle_\infty = C_k f_k(\phi) |\langle \bar{u}_z \rangle^i|^2 \quad (5.27)$$

$$\langle \epsilon \rangle_\infty = C_\epsilon f_\epsilon(\phi) \frac{|\langle \bar{u}_z \rangle^i|^3}{d_p} \quad (5.28)$$

où $f_k(\phi)$ et $f_\epsilon(\phi)$ sont des fonction de la porosité. La partie convective de la conductivité thermique s'exprime alors,

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_{eff}(r)}{\lambda_f} &= \phi(\rho C_p)_f \frac{\langle \nu_T \rangle_\infty^i}{\lambda_f \sigma_t} \\ &= \frac{C_k^2 C_\mu}{\sigma_t C_\epsilon} \frac{f_k^2(\phi(r))}{f_\epsilon(\phi(r))} Pr \cdot Re_p \end{aligned} \quad (5.29)$$

$f_k(\phi)$ et $f_\epsilon(\phi)$ sont des fonctions de la porosité tendant vers zéro lorsque la porosité tend vers 1. Ce faisant, la décroissance de la conductivité effective en s'approchant de la paroi est acquise. En effet, lorsque $f_k(\phi)$ et $f_\epsilon(\phi)$ tendent vers zéro, les termes de production sous-filtre s'évanouissent. Cela revient à passer progressivement d'un milieu poreux vers un milieu libre. De ce fait le mélange par dispersion mécanique décroît en s'approchant de la paroi. Bien que ce modèle permet de capturer avec beaucoup de satisfaction la conductivité effective dans la zone intérieure, il doit cependant être amélioré en région proche paroi [89].

5.3.2 Région intérieure : $r < R - d_p/2$

Le milieu que nous considérons est fortement inhomogène dans la direction radiale comme l'indique le profil de porosité sur la figure 4.7. Cette inhomogénéité semble grandement affecter la conductivité effective. En effet, comme le montre la figure 5.2, la conductivité effective reconstruite à partir de la base de données générée par des simulations 3D,

$$\lambda_{eff}(r) = -\rho_f \phi(C_p)_f \frac{\langle \delta u_r \delta \bar{T} \rangle^i + \langle \bar{u}_r' \bar{T}' \rangle^i + \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i}{\frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i} \quad (5.30)$$

semble être proportionnelle au gradient de la porosité dans la région intérieure. Ce faisant, l'information concernant la fraction de fluide à chaque position

radiale ne suffit pas pour capturer la dynamique du transport de la chaleur. En effet, nous avons montré au chapitre 2 (équation (2.8)) que le gradient de porosité est relié à l'intégrale de la normale aux surfaces solides présentes à l'intérieur du VER.

$$\nabla_i \phi = -\frac{1}{V} \int_S n_i dS \quad (5.31)$$

Prenons l'exemple illustré sur la figure 5.3. Les quatre motifs présentés ont la même porosité. Cependant les deux motifs de gauche sont des motifs que l'on peut considérer homogènes au sens $-\frac{1}{V} \int_S n_i dS = 0$ alors que les deux motifs de droite sont inhomogènes. L'inhomogénéité influe en effet sur les mécanismes de transport en perturbant l'écoulement autour des obstacles solides. Un écoulement turbulent à travers les deux motifs homogènes (à gauche) de la figure 5.3 donne lieu à des structures (zone de recirculation par exemple) identiques alors que le même écoulement à travers les motifs inhomogènes (à droite) produit des structures turbulentes différentes dans ces deux motifs étant donné que l'arrangement des particules solides est différent. Pour les milieux inhomogènes, il faut capturer la perturbation de la dynamique par l'inhomogénéité de l'arrangement des particules par le biais du gradient de la porosité $\nabla_r \phi$. La conductivité thermique effective macroscopique proposée dans la zone intérieure prend alors la forme suivante,

$$(\lambda_{eff})_s = \rho_f (C_p)_f \frac{\phi(\nu_T)_s}{\sigma_{t1}(Re_p)} \left(1 - a_1(Re_p) R \nabla_r \phi \right) \quad (5.32)$$

avec $(\nu_T)_s$ la viscosité dynamique définie par $(\nu_T)_s = 0.09 \frac{(K)_s^2}{(\epsilon)_s} \frac{C_{m1}}{\phi}$ (voir l'équation (4.77)), ρ_f la densité du fluide, $(C_p)_f$ la capacité calorifique du fluide, R le rayon du tube, $\sigma_{t1}(Re_p)$ le nombre de Prandtl turbulent macroscopique et $a_1(Re_p)$ une constante mesurant l'influence de l'inhomogénéité.

5.3.3 Région proche paroi : $R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10$

Nous avons montré que la région proche paroi est sujette à l'effet de canalisation. Par conséquent, le transport radial est fortement amorti dans cette région. Les transferts s'opérant dans cette zone sont ainsi pondérés par un facteur quantifiant le rapport de force entre l'intensité du mélange $\sqrt{(K)_s}$ (diminue en s'approchant de la paroi car la porosité augmente) et l'effet de canalisation $(u_z)_s$. La conductivité effective macroscopique prend

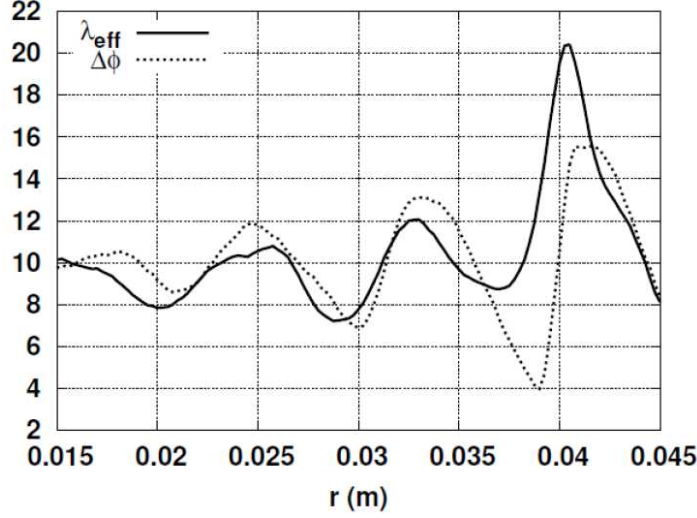


FIGURE 5.2 – Profil radial de la conductivité effective (en $W.m^{-1}.K^{-1}$) obtenue par une simulation réalisée à l'échelle du pore (5.30) et le profil radial de $\Delta\phi = a + b\nabla\phi$.

alors la forme suivante,

$$(\lambda_{eff})_s = \rho_f(C_p)_f \frac{\phi(\nu_T)_s}{\sigma_{t2}(Re_p)} \left(1 - a_2(Re_p)R\nabla_r\phi\right) \times \left(\frac{\sqrt{(K)_s}}{(u_z)_s}\right)^\gamma \quad (5.33)$$

5.3.4 Raccord à la paroi : $R - d_p/10 \leq r < R$

Le modèle macroscopique doit être raccordé à la paroi en prenant en compte la couche limite se développant sur celle-ci. Cette étape est très importante pour correctement évaluer les transferts thermiques. En effet, la paroi est une source de chaleur et les mécanismes de transferts dans la couche limite sont particuliers. De plus, dans les systèmes que nous étudions et pour les nombres de Reynolds modérés que nous considérons, les particules solides sont en partie immergées dans la couche limite. En effet, en raisonnant sur la valeur de y^+ , on peut montrer qu'une partie des particules solides côtoyant la paroi peut atteindre la zone logarithmique interne voire la zone tampon. Suzuki et al.[112], en étudiant expérimentalement une couche limite perturbée

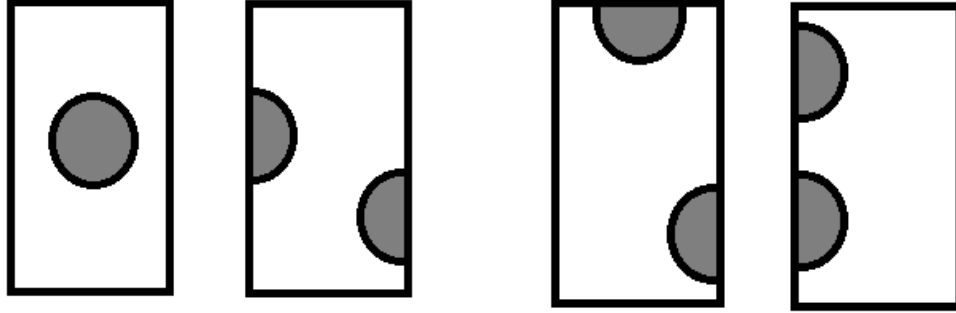


FIGURE 5.3 – Gauche : 2 motifs homogènes. Droite : 2 motifs inhomogènes.

par un cylindre ont montré que la perturbation crée une dissymétrie entre la distribution dans la direction normale à la paroi de la composante du tenseur des contraintes turbulentes $-\overline{u'_z u'_r}$ et du flux thermique turbulent $-\overline{u'_r T'}$. D'autre part, ils montrent que cette perturbation amplifie certaines composantes des fluctuations turbulentes donnant lieu à une amélioration des transferts dans la zone perturbée.

Sous couche laminaire macroscopique

Dans la sous couche laminaire les fluctuations turbulentes sont nulles ce qui permet de poser,

$$(\lambda_{eff})_s = \phi \lambda_f \quad r^+ < r_L^+ \quad (5.34)$$

avec λ_f la conductivité thermique du fluide, $r^+ = (R - r)u_\tau/\nu$ la distance à la paroi en unité de paroi et r_L^+ l'épaisseur de la couche limite visqueuse du modèle macroscopique à déterminer.

Zone logarithmique macroscopique

Pour les nombres de Reynolds considérés, la zone $r_L^+ \nu/u_\tau \leq R - r < d_p/10$ englobe la zone de tampon et la zone logarithmique du milieu libre (Table 5.1). Nous supposons dans la suite que le profil de la température est logarithmique sur l'ensemble de la zone que l'on qualifiera de zone logarithmique macroscopique.

Re_p	4 000	7 800	15 600	19 500	23 300
$R - d_p/10$	110	195	337	400	469

TABLE 5.1 – Valeurs de $R - d_p/10$ en unité de paroi pour différents nombre de Reynolds.

Considérons à présent l'équation gouvernant la température à l'échelle macroscopique dans la zone logarithmique macroscopique définie ci-dessus,

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i \right] = A \quad (5.35)$$

avec $\phi \lambda_{eff}$ la conductivité effective convective (comprenant la turbulence et la dispersion) et A une constante évaluant le flux thermique emporté par l'effet de canalisation dans la direction de l'écoulement. On vient de montrer que la couche limite était perturbée par la présence des particules solides. Considérons maintenant deux états de cette couche limite à savoir une configuration où la couche limite est faiblement perturbée par la présence des particules solides et une autre où elle est fortement perturbée.

Couche limite faiblement perturbée

Dans cette configuration, la température peut être décomposée suivant,

$$\langle \bar{T} \rangle^i = \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \epsilon \langle \bar{T} \rangle^{i1} \quad (5.36)$$

avec le petit paramètre $\epsilon \ll 1$.

Ordre 0 en ϵ :

Le profil de température non perturbée s'écrit sous la forme suivante dans la zone logarithmique considérée $\langle \bar{T} \rangle^{i0} = a \log(r^*) + b$ avec $r^* = (R - r)/dp$. Ce faisant,

$$\begin{aligned} \frac{1}{d_p^2 (R/d_p - r^*)} \frac{\partial}{\partial r^*} (R/d_p - r^*) \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i0} \right] &= A \\ \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i0} \right] &= A \cdot d_p^2 \quad \text{car} \quad r^* \ll \frac{R}{d_p} \\ \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} [a \log(r^*) + b] \right] &= A^{(1)} r^* + B(Re_p) \\ \phi \lambda_{eff}(r^*) &= A^{(2)} r^{*2} + B^{(1)}(Re_p) r^* \\ \phi \lambda_{eff}(r^*) &\cong B^{(1)}(Re_p) r^* \quad \text{car} \quad r^* \ll 1 \end{aligned} \quad (5.37)$$

Ainsi on trouve que le profil de la conductivité effective est linéaire dans la couche limite, ce qui est cohérent avec l'expression proposée par Cheng et al.[105].

Couche limite fortement perturbée

Dans cette nouvelle configuration, la température peut être décomposée suivant,

$$\langle \bar{T} \rangle^i = \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \frac{\langle \bar{T} \rangle^{i1}}{\epsilon} \quad (5.38)$$

avec $\epsilon \ll 1$. L'équation (5.35) devient alors,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^i \right] &= A^{(3)} \\ \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \left(\epsilon \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \langle \bar{T} \rangle^{i1} \right) \right] &= \epsilon A^{(3)} \end{aligned} \quad (5.39)$$

Ordre 0 en ϵ :

$$\frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i1} \right] = 0 \quad (5.40)$$

En recherchant $\langle \bar{T} \rangle^{i1}$ sous la forme,

$$\langle \bar{T} \rangle^{i1} = \eta(Re_p) \nabla_r \langle \bar{T} \rangle^{i0} \quad (5.41)$$

et en injectant (5.41) dans (5.40) on en déduit,

$$\phi \lambda_{eff}(r^*) = \eta^{(1)}(Re_p) r^{*2} \quad (5.42)$$

Le profil de la conductivité effective est quadratique dans une couche limite fortement perturbée, ce qui est cohérent avec la formulation empirique proposée par Winterberg et al. [94].

Nous considérons ici le cas d'une couche limite légèrement perturbée pour décrire les transferts thermiques dans la zone logarithmique.

La conductivité thermique radiale s'écrit finalement,

$$(\lambda_{eff})_s = \begin{cases} \phi\lambda_f + \rho_f(C_p)_f \frac{\phi^2(\nu_T)_s}{Pr \cdot K_1(Re_p)} (1 - a_1(Re_p)R\nabla_r\phi) & \text{si } r < R - d_p/2 \\ \phi\lambda_f + \rho_f(C_p)_f \frac{\phi^2(\nu_T)_s}{Pr \cdot K_2(Re_p)} (1 - a_2(Re_p)R\nabla_r\phi) \times \left(\frac{\sqrt{(K')_s}}{(u_z)_s} \right)^\gamma & \text{si } R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10 \\ \phi\lambda_f + \frac{\phi\lambda_f}{Pr} B^{(1)}(Re_p) \frac{R-r}{d_p} & \text{si } \frac{r_L^+\nu}{u_\tau} \leq R - r < d_p/10 \\ \phi\lambda_f & \text{si } R - r < r_L^+\nu/u_\tau \end{cases} \quad (5.43)$$

où $(\nu_T)_s$ la viscosité effective définie par (4.77). L'énergie cinétique totale $(K)_s$ et la vitesse axiale $(u_z)_s$ sont obtenues en résolvant le système d'équations (4.75), (4.76), (4.78) et (4.79). Les nombres de Prandtl turbulent peuvent être reliés au nombre de Prandtl moléculaire Pr , $\sigma_{t1}(Re_p) = Pr \cdot K_1(Re_p)/\phi$ et $\sigma_{t2}(Re_p) = Pr \cdot K_2(Re_p)/\phi$ avec $Pr = 0.72$ pour l'air. $\gamma = 0.5$ et l'épaisseur de la sous couche visqueuse macroscopique vaut $r_L^+ = 3$.

Re_p	K_1	K_2	a_1	a_2	$B^{(1)}$
4 000	2.71×10^{-1}	3.81×10^{-2}	5×10^{-2}	6.25×10^{-2}	8.55×10^{-1}
7 800	2.85×10^{-1}	3.69×10^{-2}	5.26×10^{-2}	6.07×10^{-2}	1.71
15 600	3.61×10^{-1}	3.59×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.88×10^{-2}	2.56
19 500	3.61×10^{-1}	3.39×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.56×10^{-2}	2.56
23 300	3.61×10^{-1}	3.39×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.56×10^{-2}	2.56

TABLE 5.2 – Valeurs des coefficients du modèle macroscopique de la conductivité effective à différents nombres de Reynolds.

Les autres valeurs des coefficients du modèle sont regroupées dans la Table 5.2. Il est à remarquer que tous ces coefficients tendent vers une valeur constante à haut Reynolds et deviennent ainsi indépendants de Re_p .

5.4 Validation du modèle macroscopique

5.4.1 Le modèle macroscopique

Récapitulons ici le modèle macroscopique. L'équation de transport de la chaleur à l'échelle macroscopique s'écrit,

$$(\rho C_p)_f(u_z)_s \frac{\partial}{\partial z} T = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[(\lambda_{eff})_s \frac{\partial}{\partial r} T \right] \quad (5.44)$$

avec T la température à l'échelle macroscopique et $(u_z)_s$ la vitesse axiale obtenue en résolvant les équations de la dynamique présentées au Chapitre 4 ((4.75), (4.76), (4.78) et (4.79)). La conductivité effective $(\lambda_{eff})_s$ est définie par l'équation (5.43).

5.4.2 Validation du modèle macroscopique

Les simulations macroscopiques sont réalisées en imposant un flux de chaleur constant sur la paroi, $Q = 93000 W \cdot m^{-2}$. La condition de périodicité est conservée en retranchant à la sortie le flux apporté à la paroi $(\dot{m} C_p [T_{bulk,exit} - T_{bulk,inlet}])$.

On montre sur les figures 5.4 et 5.5 la validation du modèle macroscopique sur les données de simulations 3D réalisées à l'échelle du pore. On voit en effet que le profil radial de la conductivité thermique et celui de la température

Re_p	T_w micro	T_w macro	$ \Delta T_w $
4 000	1333.59	1334.724	1.134
7 800	1090.04	1091.4664	1.426
15 600	968.54	961.153	7.39
19 500	942.655	944.04	1.39
23 300	924.75	932.47	7.72

TABLE 5.3 – Estimation de la température à la paroi en Kelvin.

Re_p	T_{Bulk} micro	T_{Bulk} macro	$ \Delta T_{Bulk} $
4 000	829.46	822.87	6.59
7 800	813.88	811.96	1.92
15 600	806.55	805.35	1.2
19 500	805.22	804.14	1.08
23 300	804.18	801.3	2.88

TABLE 5.4 – Estimation de la température moyenne en Kelvin.

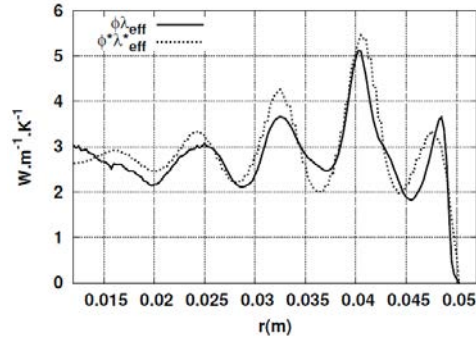
sont retrouvés avec beaucoup de satisfaction, notamment près de la paroi où les gradients de température sont importants. La température moyenne dans la direction radiale et la température sur la paroi sont aussi retrouvés avec satisfaction (Tables 5.3 et 5.4). Ces informations nous permettent d'estimer le coefficient de transfert à la paroi (Table 5.5). On peut montrer que le coefficient de transfert peut être relié au nombre de Reynolds par la corrélation suivante (voir figure 5.6),

$$Nu_w = 0.1 Re_p^{0.81} \quad (5.45)$$

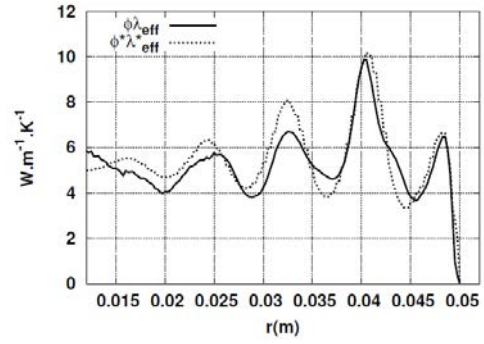
La figure 5.7 présente les corrélations dérivées dans cette étude avec un certain nombre de celles existant dans la littérature. On montre sur cette figure que les corrélations dérivées sont cohérentes avec celles proposés par les différents auteurs. En effet, la pente et l'ordre de grandeur des valeurs obtenues sont comparables avec ceux de la littérature. On confirme de plus que le coefficient de transfert à la paroi dépend non seulement de la forme des particules (voir chapitre 3) mais aussi du rapport entre le diamètre du tube et celui des particules solides [37].

Re_p	Nu_w micro	Nu_w macro	$ \Delta Nu_w $
4 000	78.84	77.65	1.5%
7 600	143.92	142.2	1.2%
15 600	245.35	255.09	3.98%
19 500	289.18	284.09	1.76%
23 300	329.63	303	8.08%

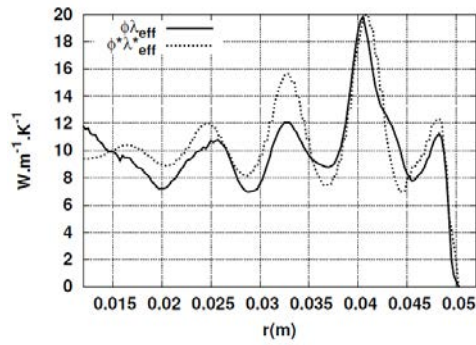
TABLE 5.5 – Estimation du coefficient de transfert à la paroi $Nu_w = \frac{Qd_p}{\lambda_f(T_w - T_{bulk})}$.



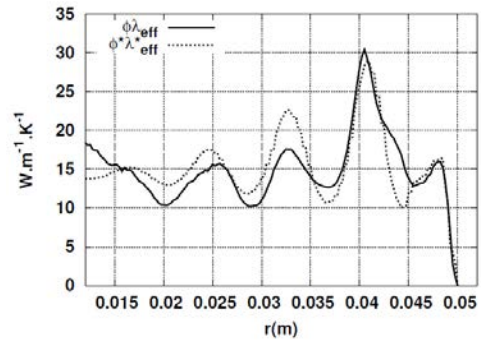
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

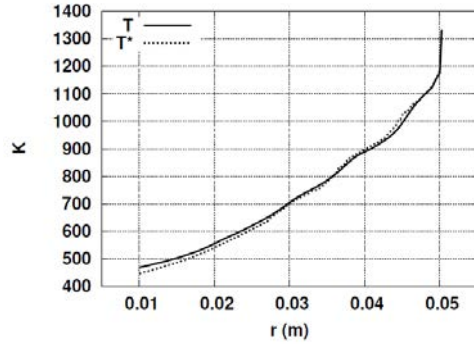


(c) $Re_p = 15600$

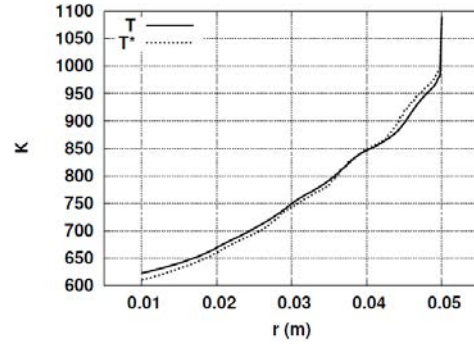


(d) $Re_p = 23300$

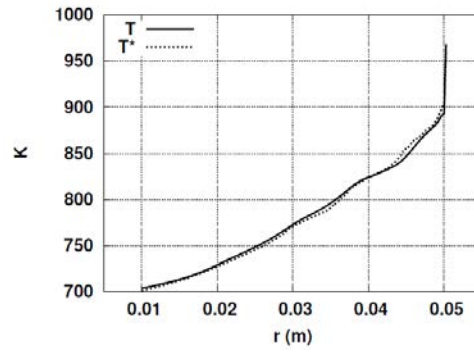
FIGURE 5.4 – Profil radial de la conductivité thermique effective en $W \cdot m^{-1} \cdot K^{-1}$, Micro $\phi\lambda_{eff}$ vs Macro $\phi^*\lambda_{eff}^*$.



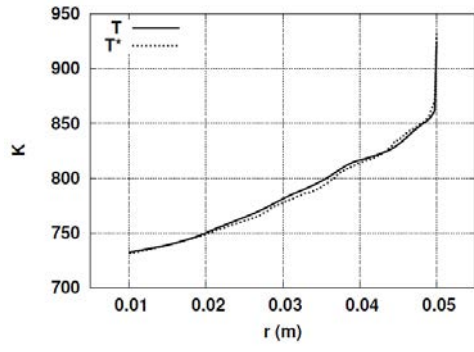
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$



(c) $Re_p = 15600$



(d) $Re_p = 23300$

FIGURE 5.5 – Profil radial de la température en Kelvin à l'échelle macroscopique, Micro T vs Macro T^* .

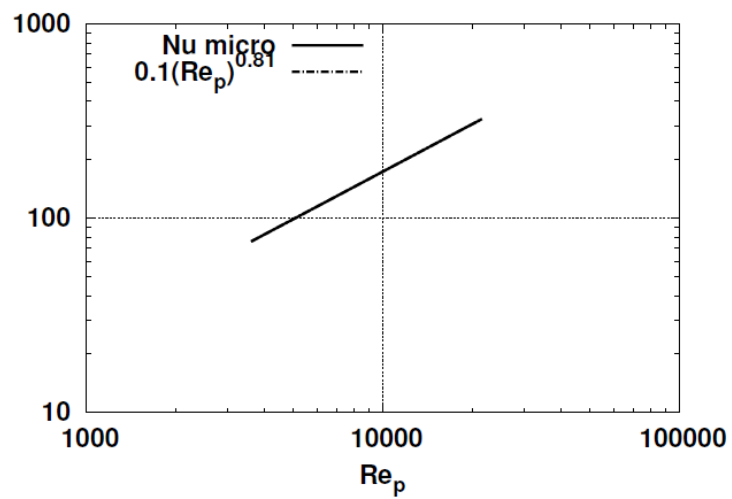


FIGURE 5.6 – Corrélation décrivant l'évolution du coefficient de transfert à la paroi en fonction du nombre de Reynolds (Cas 2).

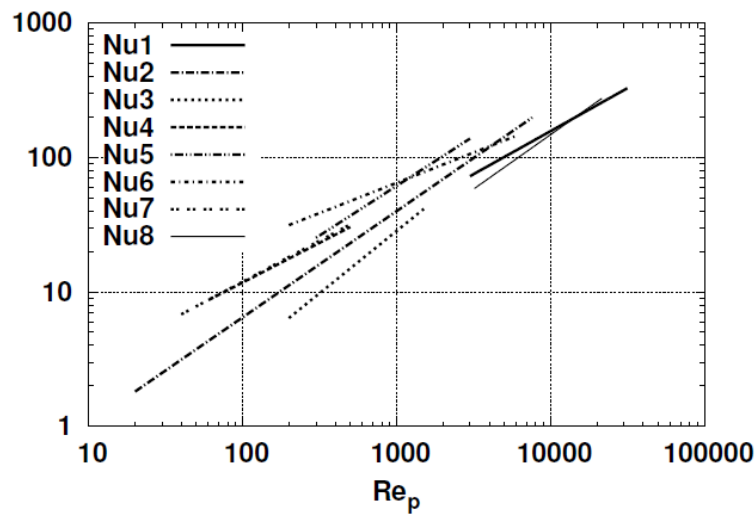


FIGURE 5.7 – Comparaison des corrélations dérivées avec un certain nombre de corrélations existant dans la littérature (Table 3.2). Nu1 : Corrélation trouvée pour le Cas 1 (chapitre 3) ; Nu2 : Li et al. (1977) [53] ; Nu3 : Demirel et al. (2000) [63] ; Nu4 : Dixon et al. (1984) [67], Nu5 : Dixon et al. (1997) [62] ; Nu6 : Peters et al. (1988) [68] ; Nu7 : Dixon et al. (1985) [113] ; Nu8 : corrélation trouvée dans ce chapitre pour le Cas 2.

5.5 Conclusion

En suivant l'approche adoptée par Teruel et al. et Mathey, nous avons développé un modèle à deux zones, basé sur la dynamique locale de l'écoulement et de la turbulence, pour décrire la diffusion convective de la chaleur dans la direction radiale. Le modèle de conductivité thermique proposé permet de retrouver avec beaucoup de satisfaction les profils de température dans la direction radiale. En supposant que la couche limite est légèrement perturbée par la présence des particules solides, nous avons dérivé une loi linéaire décrivant la décroissance de la conductivité thermique dans la couche limite, ce qui permet de retrouver la température de la paroi et le coefficient de transfert à la paroi avec satisfaction. De plus, on note avec satisfaction que ces coefficients de transfert sont cohérents avec ceux existant dans la littérature (voir Annexe C).

L'approche alternative étudiée ici montre que les coefficients du modèle classique (h_w notamment) sont très dépendant de la structure géométrique de l'empilement et de la dynamique de l'écoulement. En effet, on voit que la forme et la taille (rapport entre le diamètre du tube et le diamètre équivalent du catalyseur) des particules solides affectent les coefficients du modèle classique comme l'atteste d'ailleurs l'éparpillement des corrélations existant dans la littérature. Ainsi, il semble que les corrélations que l'on peut dériver pour les coefficients du modèle classique ne peuvent qu'être spécifiques aux configurations étudiées.

Conclusion

La maîtrise des transferts thermiques est un enjeu critique dans les unités de production d'hydrogène (SMR : Steam Methane Reforming). En effet, c'est la chaleur qui contrôle la productivité des réacteurs catalytiques ainsi que leur durée de vie. Or, l'efficacité des réacteurs tubulaires actuels est limitée par l'existence de différentes résistances thermiques s'opposant au transport de l'énergie calorifique apportée à la paroi. De ce fait, l'énergie accumulée dans la région proche paroi finit avec le temps par endommager les tubes entraînant l'arrêt de la production et le retubage.

Des modèles simplifiés ont été construits afin de décrire le transport de chaleur dans ces types de système (modèles à deux coefficients $\lambda_r - h_w$). Cependant, les corrélations empiriques décrivant les paramètres du modèle sont nombreuses et disperses montrant que les mécanismes physiques pilotant les transferts thermiques restent encore assez mal-connus. L'introduction récente de la CFD dans ce domaine de l'industrie a suscité de nouvelles démarches visant d'une part à améliorer les modèles existants et d'autre part à proposer de nouvelles approches permettant de comprendre et de modéliser les mécanismes physiques responsables des différentes résistances thermiques observées et mesurées, ainsi que ceux œuvrant à transporter et à distribuer la chaleur apportée à la paroi. C'est dans ce contexte que le travail présenté ci-dessus s'inscrit.

La zone critique est effectivement celle qui avoisine la paroi. En effet, la majeure partie de la résistance thermique y est localisée. C'est cette zone qui est particulièrement ciblée par notre étude.

Nous avons au chapitre 1 réalisé des systèmes de référence représentatifs de l'intérieur des réacteurs tubulaires. A l'aide de simulations 3D réalisées à l'échelle du pore, une base de données de référence est créée.

Au chapitre 2, il a été question de mettre en place une méthodologie permettant de transporter les informations de l'échelle du pore à l'échelle

d'observation et ce de façon univoque. Ce travail est réalisé en adoptant le formalisme du milieu poreux et en étendant la notion de Volume Élémentaire Représentatif (VER) à des systèmes inhomogènes, anisotropes et confinés que nous considérons. On montre dans ce chapitre qu'une convergence additionnelle doit être vérifiée (convergence des VERs) pour garantir la fiabilité physique des résultats de la CFD (Computational Fluid Dynamics). Il a ainsi été possible de récolter des informations statistiquement pertinentes de la région proche paroi à l'échelle d'observation.

Nous nous sommes premièrement intéressés au modèle à deux coefficients au chapitre 3. Le coefficient de transfert à la paroi est revisité par une approche qui permet de mettre en lumière les mécanismes physiques gouvernant les transferts à la paroi. On montre que l'inhomogénéité du milieu dans la direction radiale et la dispersion mécanique sont les principaux moteurs gouvernant le transfert à la paroi. Il est aussi observé que tout le milieu participe au transfert à la paroi même si le poids des contributions des mécanismes physiques s'évanouit rapidement avec la distance à la paroi. L'effet de canalisation proche paroi et sa contribution à la résistance thermique sont indirectement capturés. Finalement, on montre qu'à partir des équations fondamentales régissant la dynamique de l'écoulement et les transferts thermiques à l'échelle du pore, il est possible de retrouver la forme empirique des corrélations proposées dans la littérature.

L'approche alternative au modèle à deux coefficients est étudiée aux chapitres 4 et 5. Le chapitre 4 est consacré à l'étude de la dynamique turbulente de l'écoulement dans les réacteurs tubulaires. Dans la zone proche paroi d'épaisseur égale à $d_p/2$, il est montré que cette dynamique se distingue nettement de celle que l'on peut observer dans la zone intérieure. En effet, la zone proche paroi est caractérisée par une faible résistance à l'écoulement dans la direction axiale et une forte résistance aux mécanismes diffusifs dans la direction radiale. Les différents effets dans la zone proche paroi découlent directement de la configuration géométrique particulière de l'empilement imposée par la présence de la paroi. Il est aussi montré que la dispersion peut être associée à la turbulence à l'échelle macroscopique validant ainsi l'approche de Teruel et al. [82, 84]. Les résultats du chapitre 4 sont ensuite exploités pour construire au chapitre 5 une conductivité thermique effective dépendant de la position radiale $(\lambda_{eff})_s(r)$. On montre que cette conductivité effective dépend à la fois de la dynamique de l'écoulement et de l'influence de l'inhomogénéité de la matrice poreuse sur l'écoulement. Dans la zone proche paroi, elle subit en outre l'influence de l'effet de canalisation qui tend à amor-

tir les transferts dans la direction radiale. Les transferts sont pondérés dans cette zone par le rapport des forces qui existe entre l'énergie de mélange (turbulence et dispersion) et l'effet de canalisation. Finalement, les transferts dans la couche limite sont prises en compte par une loi de paroi. Cette loi de paroi dérivée en considérant une couche limite légèrement perturbée par la matrice solide permet de retrouver avec satisfaction la température de paroi pour un flux imposé à la paroi.

Bien que cette étude est limitée à un milieu peu compact (porosité élevée), la méthodologie à adopter pour étudier ce type de système a été clairement posée et les principaux mécanismes physiques ont pu être mis en évidence. En améliorant l'étape d'empilement (compacité), du maillage (qualité et densité) et celle du calcul (modèle de turbulence, voir Annexe B) tout en considérant des systèmes plus grands (atteindre la convergence statistique des VERs), des corrélations simplifiées fiables et robustes peuvent être dérivées à l'aide de la simulation numérique.

Il a été démontré dans cette étude que la dispersion est un mécanisme essentiel dans ce type de milieu. Elle mérite une étude approfondie afin de vérifier notamment si sa dynamique est semblable à celle de la turbulence. En effet, on voit par exemple sur la figure 5.8, que les corrélations spatiales des fluctuations (moments d'ordre deux) semblent s'organiser en structures cohérentes de grandes tailles dans la zone proche paroi.

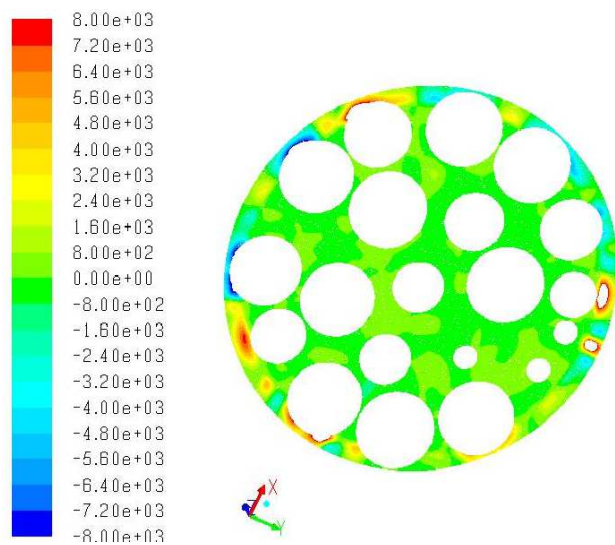


FIGURE 5.8 – Répartition de $\delta \bar{u}_r \delta \bar{T}$. Cas 1, $Re_p \approx 7200$.

Annexe A

Erreurs de discrétisation : une affaire de qualité de maillage [114, 36, 115, 116]

L'équation (1.53) peut être discrétisée à l'intérieur d'un volume de contrôle. La valeur du champ $\psi(\mathbf{x})$ est calculée et sauvegardée au centre du volume de contrôle repéré par $\mathbf{x}_C$,

$$\int_{V_c} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_C) dV = 0 \quad (\text{A.1})$$

Le gradient normal à une face délimitant le volume de contrôle et le flux la traversant peuvent être définis et calculés au noeud se trouvant au centre de cette face repéré par $\mathbf{x}_f$

$$\int_S (\mathbf{x} - \mathbf{x}_f) d\mathbf{S} = 0 \quad (\text{A.2})$$

En utilisant le développement de Taylor, la discrétisation du champ $\psi(\mathbf{x})$ dans un volume de contrôle s'écrit

$$\psi(\mathbf{x}) = \psi(\mathbf{x}_C) + (\mathbf{x} - \mathbf{x}_C) \cdot \nabla \psi(\mathbf{x})|_{\mathbf{x}_C} + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|^2) \quad (\text{A.3})$$

La moyenne volumique de la quantité $\psi(\mathbf{x})$ dans le volume de contrôle s'écrit,

$$\int_{V_c} \psi(\mathbf{x}) dV = \psi_C V_c + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_C|^2) \quad (\text{A.4})$$

avec ψ_C , la valeur de $\psi(\mathbf{x})$ au centre de la cellule et V_c , le volume de la cellule. De même, les moyennes surfaciques deviennent

$$\int_S \psi(\mathbf{x}) dS = \psi_f S + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \quad (\text{A.5})$$

avec ψ_f , la valeur de $\psi(\mathbf{x})$ au centre de la face considérée.

$$\int_S \vec{V} \cdot d\mathbf{S} = \vec{V}_f \cdot \mathbf{S} + O(|\mathbf{x} - \mathbf{x}_f|^2) \quad (\text{A.6})$$

avec $\vec{V}_f$, la valeur du vecteur $\vec{V}$ au centre de la face considérée. Au besoin, la valeur au centre des faces peut être interpolée à partir des valeurs calculées au centre des cellules. Les quantités surmontées de l'indice $*$ repèrent ci-dessous ces valeurs interpolées. Pour deux cellules voisines de forme et de volume différents (tétraèdres dans un maillage non structuré), le segment qui joint les centres P et N de ces cellules n'intersecte pas forcément la face commune en son centre. Dans de tels cas, les valeurs au centre de la face sont obtenues de la façon suivante.

$$\psi_f^* = \psi_{f_i}^* + \mathbf{m} \cdot (\nabla \psi)_{f_i}^* \quad (\text{A.7})$$

où f_i repère le point d'intersection du segment joignant le centre des cellules voisines sur leur face commune et $\mathbf{m}$ est le vecteur joignant f_i au centre de la face f (voir figure 1.13). L'évaluation des valeurs au point d'intersection peut être obtenue par interpolation linéaire,

$$\psi_{f_i}^* = f_x \psi_P + (1 - f_x) \psi_N \quad (\text{A.8})$$

$$(\nabla \psi)_{f_i}^* = f_x (\nabla \psi)_P + (1 - f_x) (\nabla \psi)_N \quad (\text{A.9})$$

où f_x est défini par (1.6). On définit l'erreur faite en interpolant la valeur d'une quantité au centre d'une face à partir de la valeur au centre des cellules voisines de la façon suivante,

$$e_{inter} = \psi_f - \psi_f^* \quad (\text{A.10})$$

Le développement de Taylor permet d'exprimer ψ_f , ψ_P et ψ_N comme suit,

$$\psi_f = \psi_{f_i} + \mathbf{m} \cdot (\nabla \psi)_{f_i} + \frac{1}{2} \mathbf{m}^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i} \quad (\text{A.11})$$

$$\psi_P = \psi_{f_i} + (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{f_i}) \cdot (\nabla \psi)_{f_i} + \frac{1}{2} (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{f_i})^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i} \quad (\text{A.12})$$

$$\psi_N = \psi_{f_i} + (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_{f_i}) \cdot (\nabla \psi)_{f_i} + \frac{1}{2}(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_{f_i})^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i} \quad (\text{A.13})$$

En utilisant (A.7) et (A.11), l'erreur d'interpolation peut être décomposée comme ci-dessous.

$$e_{inter} = e_l + \nabla e_l \quad (\text{A.14})$$

avec,

$$\begin{aligned} e_l &= \psi_{f_i} - \psi_{f_i}^* \\ &= -\frac{1}{2}|\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_{f_i}||\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_{f_i}|(\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i}) \\ &= -\frac{1}{2}f_x(1 - f_x)|\mathbf{d}^2|(\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i}) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

et

$$\begin{aligned} \nabla e_l &= (\nabla \psi)_{f_i} - (\nabla \psi)_{f_i}^* \\ &= -\frac{1}{2}f_x(1 - f_x)|\mathbf{d}^2|(\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_{f_i}) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

où $\hat{\mathbf{d}}$ est le vecteur unitaire dans la direction $\mathbf{d}$.

L'erreur d'interpolation s'écrit finalement,

$$\begin{aligned} e_{inter} &= -\frac{1}{2}|\mathbf{d}|^2[f_x(1 - f_x)(\hat{\mathbf{d}}^2 : ((\nabla \nabla \psi)_{f_i}) + \Psi|\mathbf{d}|\hat{\mathbf{m}} \cdot (\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_{f_i})] \\ &\quad + \frac{\Psi^2}{2}|\mathbf{d}|^2(\hat{\mathbf{m}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i}) \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

L'équation (A.17) met ainsi en évidence la relation entre erreur d'interpolation et la qualité du maillage. L'erreur est rendue minimale lorsque l'intensité de la dissymétrie est nulle ($\Psi = 0$, voir la définition (1.7)).

La discrétisation de tout terme de divergence se fait en utilisant le théorème de flux-divergence,

$$\int_{V_c} \nabla \cdot \mathbf{a} dV = \oint_S d\mathbf{S} \cdot \mathbf{a} = \sum_f \int_{S_f} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{a} = \sum_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{a}_f \quad (\text{A.18})$$

L'erreur engendrée par le terme de divergence s'écrit alors,

$$\begin{aligned}
e_{div} &= \sum_f \mathbf{S}_f \cdot (\mathbf{a}_f - \mathbf{a}_f^*) \\
&= \sum_f \mathbf{S}_f \cdot \mathbf{e}_{inter} \\
&= \sum_f -\frac{1}{2} |\mathbf{d}|^2 \mathbf{S}_f \cdot [f_x(1-f_x)(\hat{\mathbf{d}}^2 : ((\nabla \nabla \psi)_{f_i}) + \Psi |\mathbf{d}| \hat{\mathbf{m}} \cdot (\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_{f_i})] \\
&\quad + \sum_f \frac{\Psi^2}{2} |\mathbf{d}|^2 \mathbf{S}_f \cdot (\hat{\mathbf{m}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_{f_i})
\end{aligned} \tag{A.19}$$

L'expression (A.19) montre que tout terme de divergence de flux engendre lors de la discrétisation des erreurs d'interpolation qui s'accroissent avec la mauvaise qualité du maillage (dissymétrie). La qualité du maillage ne se réduit pas à la dissymétrie. Pour s'en convaincre, intéressons nous par exemple au terme de diffusion,

$$\int_{V_c} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi) dV = \sum_f \mathbf{S} \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi)_f = \sum_f (\rho \Gamma_\psi)_f (\mathbf{S} \cdot \nabla \psi)_f \tag{A.20}$$

Lorsque le maillage est non-orthogonal, c'est à dire lorsque l'angle formé entre le vecteur joignant le centre de deux cellules voisines et le vecteur normal à la surface partagée par ces cellules n'est pas nul (figure A.1), $(\mathbf{S} \cdot \nabla \psi)_f$ peut être approximé comme suit,

$$(\mathbf{S} \cdot \nabla \psi)_f^* = |\mathbf{\Delta}| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f^* \tag{A.21}$$

où $|\mathbf{\Delta}|$, parallèle à $\mathbf{d}$, vérifie avec $\mathbf{k}$ (figure A.1),

$$\mathbf{S} = \mathbf{\Delta} + \mathbf{k} \tag{A.22}$$

En admettant que $\mathbf{k}$ et $\mathbf{S}$ sont orthogonaux et que la dissymétrie est nulle ($\mathbf{m} = 0$), le développement de Taylor donne,

$$\psi_P = \psi_f + (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \psi)_f + \frac{1}{2} (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f)^2 : (\nabla \nabla \psi)_f + \frac{1}{6} (\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f)^3 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_f \tag{A.23}$$

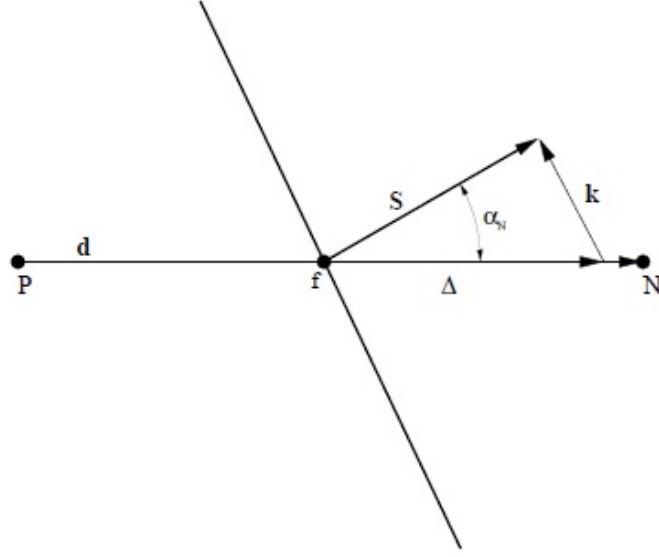


FIGURE A.1 – angle formé par la non-orthogonalité des cellules voisines

$$\psi_N = \psi_f + (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f) \cdot (\nabla \psi)_f + \frac{1}{2} (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f)^2 : (\nabla \nabla \psi)_f + \frac{1}{6} (\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f)^3 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_f \quad (\text{A.24})$$

En substituant (A.23), (A.24) et (A.9) dans (A.21), l'erreur engendrée par la

non-orthogonalité s'écrit,

$$\begin{aligned}
e_{orth} &= (\mathbf{S} \cdot \nabla \psi)_f - (\mathbf{S} \cdot \nabla \psi)_f^* \\
&= -\frac{1}{2} \frac{|\Delta|}{|\mathbf{d}|} (|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f|^2 - |\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f|^2) \hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_f \\
&\quad - \frac{1}{6} \frac{|\Delta|}{|\mathbf{d}|} (|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f|^3 - |\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f|^3) \hat{\mathbf{d}}^3 :: (\nabla \nabla \nabla \psi)_f \\
&\quad - \frac{1}{2} |\mathbf{x}_N - \mathbf{x}_f| |\mathbf{x}_P - \mathbf{x}_f| \mathbf{k} \cdot (\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_f) \\
&= -\frac{|\mathbf{S}|}{\cos \alpha_N} \frac{|\mathbf{d}|}{2} (2f_x - 1) (\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \psi)_f) \\
&\quad - \frac{|\mathbf{S}|}{\cos \alpha_N} \frac{|\mathbf{d}|^2}{6} ((1 - f_x)^3 + f_x^3) \hat{\mathbf{d}}^3 :: (\nabla \nabla \nabla \psi)_f \\
&\quad - \mathbf{S} \tan \alpha_N \frac{|\mathbf{d}|}{2} f_x (1 - f_x) \hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{d}}^2 : (\nabla \nabla \nabla \psi)_f)
\end{aligned} \tag{A.25}$$

où $\hat{\mathbf{d}}$ et $\hat{\mathbf{k}}$ sont les vecteurs unitaires dirigés respectivement selon $\mathbf{d}$ et $\mathbf{k}$ et α_N , l'angle formé par $\mathbf{S}$ et Δ . On remarque premièrement que lorsque le maillage n'est pas uniforme ($f_x \neq 0.5$), l'erreur est de premier ordre. Ainsi, l'uniformité du maillage est un critère important déterminant la précision de la solution calculée. L'erreur est aussi pilotée par la valeur de l'angle α_N . Elle est minimale pour $\alpha_N = 0$. Le terme de diffusion s'écrit finalement,

$$\int_{V_c} \nabla \cdot (\rho \Gamma_\psi \nabla \psi) dV = \sum_f (\rho \Gamma_\psi)_f^* (|\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f^*) + e_{diff} \tag{A.26}$$

avec,

$$e_{diff} = \sum_f (\rho \Gamma_\psi)_f^* e_{orth} + (|\Delta| \frac{\psi_N - \psi_P}{|\mathbf{d}|} + \mathbf{k} \cdot (\nabla \psi)_f^*) e_{inter} + e_{orth} e_{inter} \tag{A.27}$$

Le terme source est quant à lui généralement linéarisé comme suit,

$$S_\psi = S_C + S_P \psi \tag{A.28}$$

où S_C est la partie constante et indépendante des variables inconnues ψ . En utilisant de nouveau le développement de Taylor,

$$S_\psi = S^* + \left(\frac{\partial S}{\partial \psi} \right)^* (\psi - \psi^*) \tag{A.29}$$

où les quantités surmontées d'une étoile sont les valeurs connues de l'itération précédente. On identifie finalement les termes,

$$S_C = S^* - \left(\frac{\partial S}{\partial \psi}\right)^* \psi^* \quad (\text{A.30})$$

et

$$S_P = \left(\frac{\partial S}{\partial \psi}\right)^* \quad (\text{A.31})$$

Le terme source discrétisé s'écrit dans une cellule de centre N,

$$\int_{V_N} S(\psi, \mathbf{x}) dV = S_C V_N + S_P \psi_N V_N + e_{source} \quad (\text{A.32})$$

L'erreur qui en surgit n'est que l'erreur de troncature venant du développement de Taylor. Elle est proportionnelle à la taille de la maille au carré. Elle s'amortit avec la réduction de la taille des mailles.

$$e_{source} \propto (\mathbf{x} - \mathbf{x}_N)^2 \quad (\text{A.33})$$

Annexe B

Calcul LES de référence

B.1 Introduction

Lorsque l'on étudie un écoulement turbulent, la gamme d'échelles mise en jeu augmente avec le nombre de Reynolds.

$$\frac{L_u}{\eta} = Re_{L_u}^{3/4} \quad (\text{B.1})$$

où L_u est l'échelle intégrale caractérisant les tourbillons de grande taille, η l'échelle de Kolmogorov caractérisant les structures tourbillonnaires de petite taille et Re_{L_u} le nombre de Reynolds basé sur l'échelle intégrale et la vitesse caractéristique de la turbulence ($u' = \sqrt{2k/3}$ avec k , l'énergie cinétique turbulente). En effet, l'énergie cinétique créée à l'échelle intégrale est transférée vers les échelles de plus en plus petites jusqu'à sa dissipation, activant ainsi toute la gamme d'échelles évoquée.

$$\frac{\partial E(\kappa, t)}{\partial t} = T(\kappa, \kappa', t) - 2\nu\kappa^2 E(\kappa, t) \quad (\text{B.2})$$

où κ est le nombre d'onde, $E(\kappa, t)$ est le spectre d'énergie fluctuante et $T(\kappa, \kappa', t)$ la densité spectrale de flux d'énergie cinétique fluctuante qui est le bilan net des transferts d'énergie cinétique entre le mode κ et tous les modes κ' vérifiant [39],

$$\int_0^{+\infty} T(\kappa, \kappa', t) d\kappa = 0 \quad (\text{B.3})$$

L'équation (B.2) stipule que la variation d'énergie du mode κ est le résultat du bilan entre le transfert d'énergie positif ou négatif vers les autres

modes κ' et l'énergie perdue par dissipation visqueuse. La courbe décrivant le spectre d'énergie fluctuante (Figure B.1) permet de visualiser l'énergie portée par chacun des nombres d'onde κ .

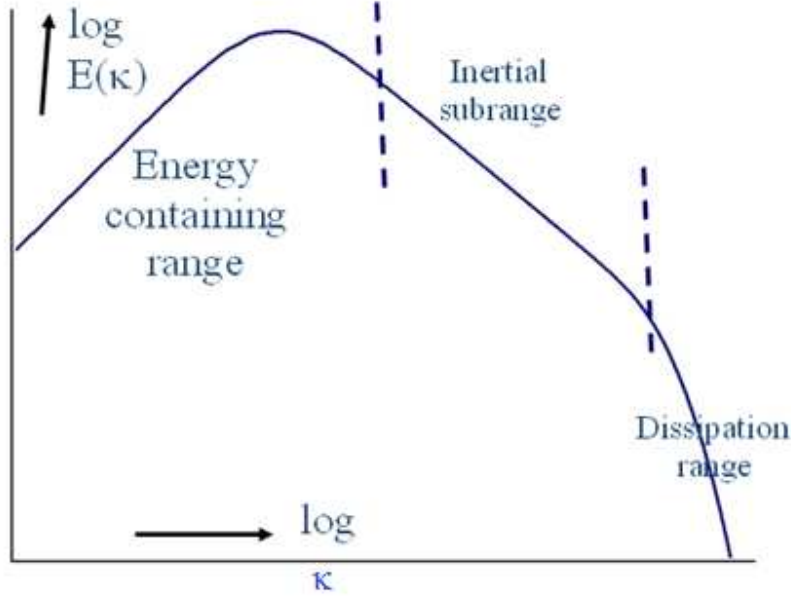


FIGURE B.1 – Spectre d'énergie de Kolmogorov

On remarque que ce sont les grandes échelles contenant les plus grandes structures turbulentes qui contiennent le plus d'énergie. La zone inertielle caractérisée par une loi de décroissance en $\kappa^{-5/3}$ est la zone de transfert pur. En effet dans cette zone $T(\kappa, \kappa', t) \approx 0$ stipulant que l'énergie venant des grandes échelles est complètement transférée vers les petites échelles (à la dissipation visqueuse près). Enfin la zone de dissipation est une zone de destruction d'énergie.

Pour des raisons bien connues, liées aux ressources informatiques insuffisantes et au temps de calcul astronomique, il est actuellement difficile voire impossible de pouvoir résoudre les équations de Navier-Stokes sans aucune modélisation supplémentaire (DNS) pour étudier les écoulements turbulents dans des géométries aussi complexes que les réacteurs tubulaires. Le plus

souvent on se restreint à des modèles de type RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) où toutes les échelles de la turbulence sont modélisées. L'approche intermédiaire consiste à ne résoudre que la dynamique des grandes échelles qui portent la majorité de l'énergie cinétique turbulente et modéliser les petites échelles. Pour ce faire les équations de Navier-Stokes sont filtrées et l'échelle de coupure doit être située dans la zone inertielle pour que la séparation des échelles ait un sens. C'est l'approche LES (Large Eddy Simulation). Cette approche reste encore très coûteuse et ne peut être utilisée que sur des configurations relativement simples.

B.2 Filtres et modèles de sous-maille[117, 41, 118]

Les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles et instationnaires qui décrivent la dynamique des tourbillons porteurs d'énergie sont explicitement résolues. L'influence des petits tourbillons (dont la dynamique présente un caractère plus universel que celle des tourbillons de grande taille) sur les grands est quant à elle modélisée via des modèles de sous-maille. Le modèle de sous-maille doit être capable de décrire le transfert d'énergie vers les petites échelles non résolues.

La variable filtrée $\{\psi\}$ est exprimée comme étant la convolution de la variable ψ par un filtre spatial $\mathbf{G}$ qui doit préserver les constantes (en vérifiant la condition de normalisation par exemple).

$$\{\psi\}(\mathbf{x}, t) = \int_{\Omega} \mathbf{G}(\mathbf{x} - \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} \quad (\text{B.4})$$

Une variable arbitraire ψ peut donc être décomposée comme suit,

$$\psi = \{\psi\} + \psi' \quad (\text{B.5})$$

Il existe une large gamme de filtres. Cependant, il est courant d'utiliser des filtres homogènes (indépendants de $\mathbf{x}$) tels que le filtre en forme de boîte ou le filtre gaussien. Toutefois, ces filtres ne sont pas idempotents $\{\{\psi\}\} \neq \{\psi\}$ entraînant $\{\psi'\} \neq 0$. Il est ainsi plus judicieux de travailler avec un filtre homogène idempotent tel que le filtre à coupure spectrale.

$$\mathbf{G}(r) = \frac{\sin(r\pi/\Delta S)}{r\pi} \quad (\text{B.6})$$

avec ΔS la largeur du filtre qui est directement liée à la taille locale du maillage.

$$\Delta S = C_G(\Delta x \Delta y \Delta z)^{1/3} \quad (\text{B.7})$$

avec C_G une constante vérifiant $C_G \geq 2$. Le nombre d'onde de coupure quant à lui s'exprime comme suit,

$$\kappa_c = \frac{2\pi}{\Delta S} \quad (\text{B.8})$$

Les équations de Navier-Stokes filtrées s'écrivent,

$$\frac{\partial \{U_i\}}{\partial x_i} = 0 \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial \{U_i\}}{\partial t} + \{U_j\} \frac{\partial \{U_i\}}{\partial x_j} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \{P\}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \{U_i\}}{\partial^2 x_j} - \frac{\partial \tau_{ijSG}}{\partial x_j} \quad (\text{B.10})$$

avec $\tau_{ijSG} = \{U_i U_j\} - \{U_i\} \{U_j\}$ le tenseur des contraintes sous-maille prenant en compte l'action des petites échelles (non résolues) sur la dynamique des grandes échelles.

Un des modèles sous-maille resté populaire est celui de Smagorinsky qui est basé sur une approche de type Boussinesq,

$$\tau_{ijSG} - \frac{2}{3} k_{SG} \delta_{ij} = -2\nu_{tSG} \{S_{ij}\} \quad (\text{B.11})$$

avec $\{S_{ij}\}$ le tenseur de déformation basé sur le champ de vitesse filtré et $k_{SG} = \frac{1}{2} \tau_{iiSG}$, l'énergie de sous-maille. La viscosité turbulente sous-maille s'exprime quant à elle,

$$\nu_{tSG} = (C_s \Delta S)^2 \sqrt{2 \{S_{ij}\} \{S_{ij}\}} \quad (\text{B.12})$$

avec $C_s \approx 0.17$ la constante de Smagorinsky. Cette constante est valide pour une turbulence homogène et isotrope et est souvent corrigée empiriquement pour les configurations d'écoulement qui s'en écartent.

B.3 LES vs. RANS : impact des modèles sur l'estimation de la turbulence

B.3.1 Calcul LES dans un tronçon d'empilement de sphères

Géométrie

Le calcul LES est réalisé dans une boîte cubique de côté 32 mm dont les faces de la frontière sont deux à deux liées par périodicité. Cette boîte contient 8 sphères entières de diamètre 15 mm. La porosité de la géométrie (volume fluide sur volume total de la boîte) est égale à 0.569 (voir la Figure B.2).

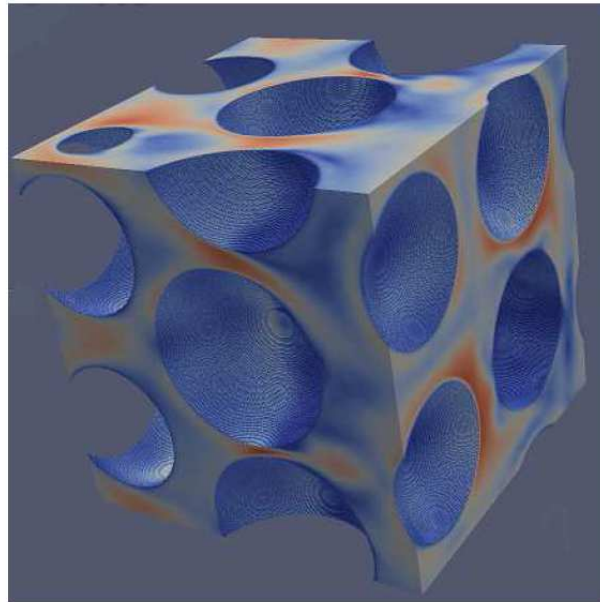


FIGURE B.2 – Représentation du domaine fluide dans la boîte périodique contenant des sphères.

Filtre spatial

La largeur du filtre et donc la taille locale du maillage (B.7) est déterminée par le critère suivant,

$$\sigma = \frac{\Delta S}{L_u} \quad (\text{B.13})$$

avec la longueur intégrale L_u estimée suivant,

$$L_u = \frac{k^{3/2}}{\epsilon} \quad (\text{B.14})$$

Les grandeurs k et ϵ sont numériquement obtenues par un calcul de type RANS (modèle $k - \epsilon$ par exemple). Par cette méthode il est possible d'avoir une idée du raffinement de maillage nécessaire pour garantir par exemple que le filtre est bien défini dans la zone inertielle ou que les grandes échelles au moins sont correctement résolues. Le maillage est d'autant meilleur que la valeur de σ est petit ($\sigma \ll 1$). La figure B.3 représente la répartition de σ sur une coupe réalisée au centre de la boîte et perpendiculaire à la direction de l'écoulement (figure B.3a). Il est montré que sur l'ensemble du domaine fluide la valeur de σ est inférieure à 1, c'est à dire que la taille des cellules est inférieure à l'échelle intégrale locale (figure B.3b). Notons de plus que la résolution semble meilleure loin des parois. En effet, $\sigma < 1/10$ (figure B.3c) dans ces régions montrant clairement que le maillage est assez fin permettant ainsi la résolution complète des grandes échelles. Cependant très proche des parois, on identifie une fine couche dans laquelle $\sigma > 1$ (figure B.3d). Ceci n'est pas une signature de l'utilisation de filtres mal adaptés dans cette région. En effet, le y^+ moyen est satisfaisant ($y^+ \approx 4$). Les mauvaises valeurs de σ dans la région proche paroi sont à attribuer à la définition de l'échelle intégrale choisie qui n'est pas adaptée à la zone proche paroi. En effet, la dissipation est très importante dans cette zone et l'énergie cinétique turbulente y est très faible. De ce fait, la longueur intégrale définie selon (B.14) devient très petite dans cette zone affichant ainsi des valeurs de σ très grandes.

Nombre de courant CFL

Le pas de temps est choisi de sorte que le nombre de courant soit égal à 1.

$$CFL = \text{Max} \left\{ \frac{u_i}{\Delta x_i} \right\} dt \approx 1 \quad (\text{B.15})$$

où u_i locale peut être obtenue par un calcul de type RANS. Pour notre étude, le pas de temps vérifiant (B.15) est $dt = 10^{-6}$ s.

Modèle de sous-maille

Dans cette étude nous avons plutôt choisi le modèle de sous-maille WALE (Wall-adapting Local Eddy-Viscosity) qui semble plus adapté au type de milieu que nous considérons. En effet, ce modèle est construit pour restituer le bon comportement asymptotique à la paroi (loi en y^3).

$$\nu_{tSG} = L_s^2 \frac{(\{S_{ij}^d\}\{S_{ij}^d\})^{3/2}}{(\{S_{ij}\}\{S_{ij}\})^{5/2} + (\{S_{ij}^d\}\{S_{ij}^d\})^{5/4}} \quad (\text{B.16})$$

avec

$$L_s = \min(\kappa d, 0.325V^{1/3}) \quad (\text{B.17})$$

avec d la distance à la paroi la plus proche, V le volume de la cellule et

$$\{S_{ij}^d\} = \frac{1}{2}(\{g_{ij}\}^2 + \{g_{ji}\}^2) - \frac{1}{3}\delta_{ij}\{g_{kk}\}^2 \quad \{g_{ij}\} = \frac{\partial\{u_i\}}{\partial x_j} \quad (\text{B.18})$$

Qualité du maillage

Le maillage du domaine fluide est exclusivement réalisé à l'aide de tétraèdres (~ 10.5 millions de cellules) et le maillage proche paroi vérifie en moyenne $y^+ \approx 4$. La qualité du maillage est mesurée par les critères suivants : la déviation du volume, la déviation angulaire, l'orthogonalité et la valeur de y^+ (figure B.4).

Moyenne temporelle

Le calcul instationnaire donne accès au champ de vitesse instantané. Afin d'obtenir des quantités RANS il faut faire la moyenne de ce champ dans le temps. Pour ce faire, l'avancement dans le temps est réalisé sur une durée de $3.5 \cdot 10^{-2}$ secondes. Cette durée correspond au temps nécessaire à une particule fluide pour effectuer une dizaine de passages à travers la boîte. Le temps nécessaire pour effectuer un passage peut être estimé à l'aide d'un calcul RANS.

$$\Delta t = \frac{c}{u_{zRANS}} \quad (\text{B.19})$$

avec c la longueur du côté de la boîte. Le profil de la vitesse traversant une section perpendiculaire à la direction de l'écoulement est tracé en fonction du temps sur la figure B.5. L'écoulement atteint un régime stationnaire au bout d'environ $t_s = 0.01$ secondes. Le champ de vitesse RANS est obtenu en moyennant le champ de vitesse instantané sur une durée égale à $5\Delta t$ à partir de t_s .

B.3.2 LES vs. RANS

Les modèles RANS haut (Realizable $k - \epsilon$) et bas ($k - \epsilon$ de Abid [119] bas Reynolds, Standard $k - \omega$ avec corrections bas Reynolds, $k - \omega$ Transition SST) Reynolds sont comparés au modèle LES.

L'écoulement est dirigé dans la direction z en imposant un gradient de pression dans cette direction. Les autres directions du domaine de calcul sont périodiquement liées.

La table B.1 présente la moyenne volumique dans le domaine de simulation de différentes quantités telles que la composante de la vitesse moyenne dans la direction de l'écoulement, l'énergie cinétique totale (turbulente et dispersive) ainsi que l'erreur faite sur ces quantités par les modèles RANS par rapport au modèle LES. Cela permet d'estimer les modèles RANS bas et haut Reynolds entre eux et d'évaluer ces modèles RANS par rapport au modèle LES.

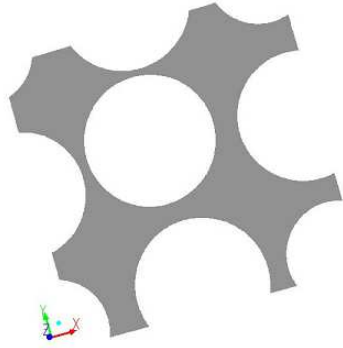
Les figures B.6 et B.7 représentent la composante u_z du vecteur vitesse obtenue par les différents modèles sur une coupe orthogonale à la direction de l'écoulement. On note que les modèles RANS (haut et bas Reynolds) reproduisent le champ de vitesse avec satisfaction (Table B.1). Une simple analyse qualitative permet de montrer que les différentes grandes structures de l'écoulement sont capturées avec satisfaction par les modèles RANS. Il doit cependant être noté que comparé au champ obtenu par le modèle haut Reynolds, le champ de vitesse prédit par le modèle $k - \epsilon$ bas Reynolds est plus proche du champ calculé par le modèle LES. Notons de plus que les modèles $k - \omega$ semblent surestimer le champ de vitesse alors que les modèles $k - \epsilon$ semblent plutôt le sous estimer.

Les figures B.8 et B.9 représentent l'énergie cinétique totale (voir Chapitre 4). On note que les modèles RANS haut et bas Reynolds ne reproduisent que partiellement les structures fluctuantes obtenues par le calcul LES. En effet, si ces fluctuations estimées par les modèles $k - \epsilon$ semblent qualitativement plus proches de celles évaluées par le modèle LES (figures B.8 et B.9),

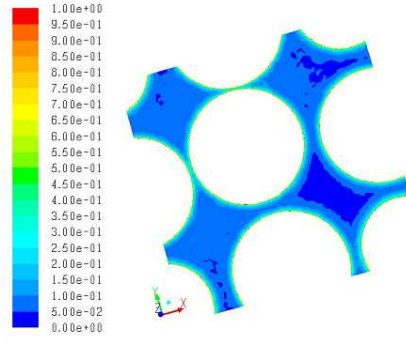
	$\langle \bar{u}_z \rangle^i (m.s^{-1})$		$\langle k_{RANS} \rangle^i + \langle k_d \rangle^i (m^2.s^{-2})$	
LES	8.297	0%	38.74	0%
Transition SST	8.92	7.51%	36.24	6.46%
$k - \omega$ bas Reynolds	8.92	7.51%	37.13	4.16%
$k - \epsilon$ bas Reynolds	7.93	4.42%	30.2	22.05%
Realizable $k - \epsilon$	7.72	6.95%	28.22	27.16%

TABLE B.1 – Évaluation de la vitesse moyenne $\langle \bar{u}_z \rangle^i$ et de l'énergie cinétique totale par différents modèles de turbulence : LES, $k - \omega$ Transition SST, Standard $k - \omega$ bas Reynolds, $k - \epsilon$ bas Reynolds et $k - \epsilon$ haut Reynolds. $Re_p \approx 4800$.

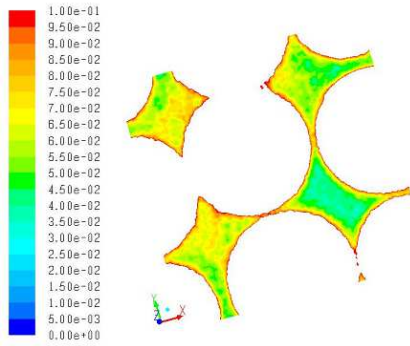
les prédictions des modèles $k - \omega$ semblent quantitativement plus proches des résultats LES (Table B.1). Les modèles $k - \epsilon$ (haut et bas Reynolds) semblent correctement estimer la répartition spatiale des structures turbulentes à l'échelle locale mais semblent sous estimer leur intensité. Les modèles $k - \omega$ semblent plutôt surestimer les extrema (minima et maxima du champ de fluctuations) ce qui les éloignent à l'échelle locale des fluctuations prédites par le modèle LES. Cependant, en appliquant la moyenne volumique aux fluctuations, ce qui a pour effet de compenser les extrema (minima et maxima), on retrouve à l'échelle macroscopique des résultats proches à ceux prédits par le modèle LES avec satisfaction. Globalement, les modèles $k - \epsilon$ (haut et bas Reynolds) semblent sous estimer la turbulence (fluctuations temporelles et spatiales) générée dans ce type de milieu. Il est aussi à remarquer que l'énergie cinétique prédite par le modèle bas Reynolds ($k - \epsilon$ bas Reynolds) ne se distingue du modèle haut Reynolds (Realizable $k - \epsilon$) que de peu, montrant que la différence entre les modèles haut et bas Reynolds est minime lorsque le modèle haut Reynolds est utilisé pour décrire la turbulence sur un maillage très raffiné, notamment près des parois ($y^+ \approx 4$).



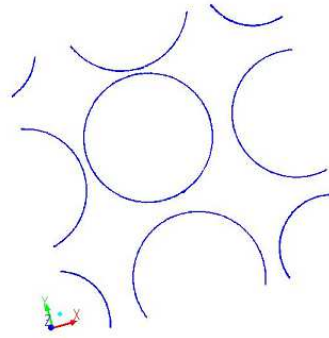
(a) Coupe du domaine fluide



(b) Répartition de σ ($0 < \sigma < 1$)

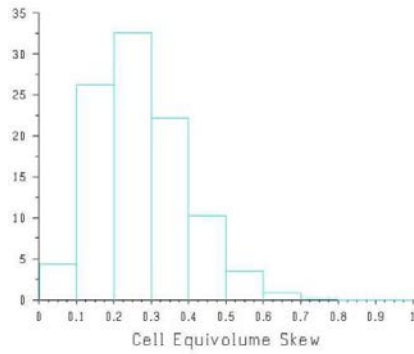


(c) Répartition de σ ($0 < \sigma < 0.1$)

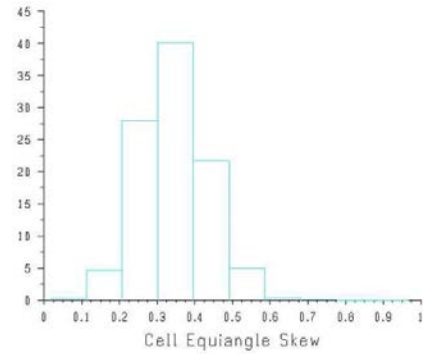


(d) Répartition de σ ($\sigma \geq 1$)

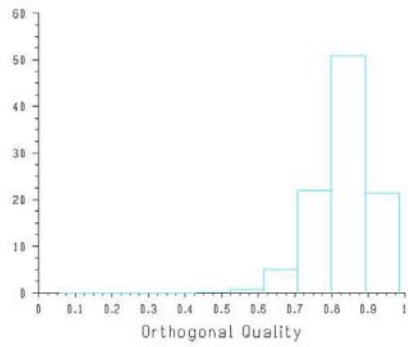
FIGURE B.3 – Évaluation de la taille du filtre spatial.



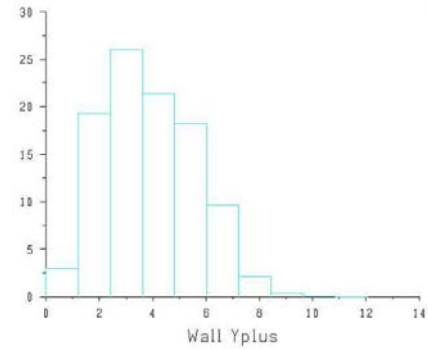
(a) Déviation du volume



(b) Déviation angulaire



(c) Orthogonalité



(d) Répartition des y^+

FIGURE B.4 – Évaluation de la qualité du maillage (voir section 1.3.2 pour plus de détail).

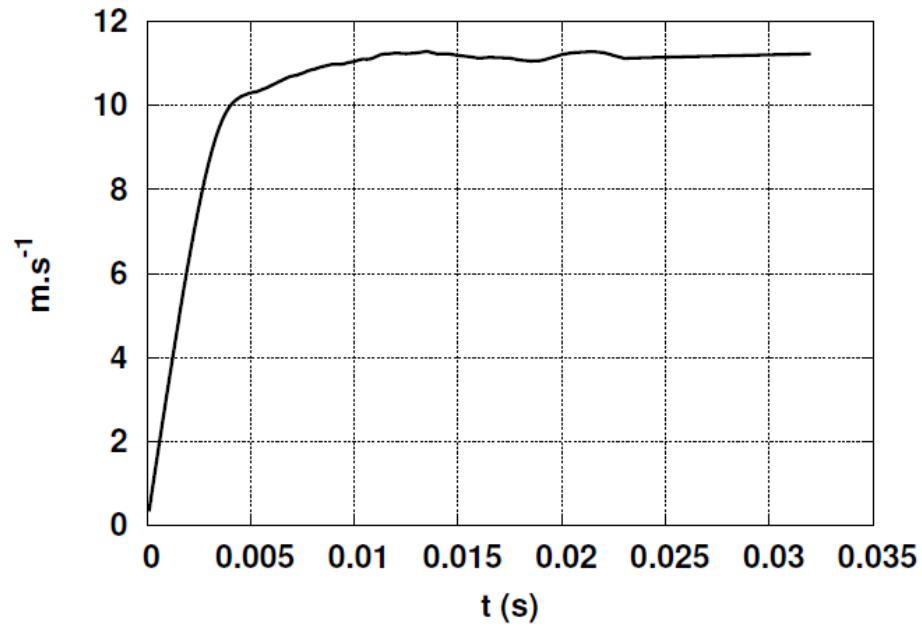


FIGURE B.5 – Évolution de la vitesse u_z en fonction du temps sur une section perpendiculaire à la direction de l'écoulement.

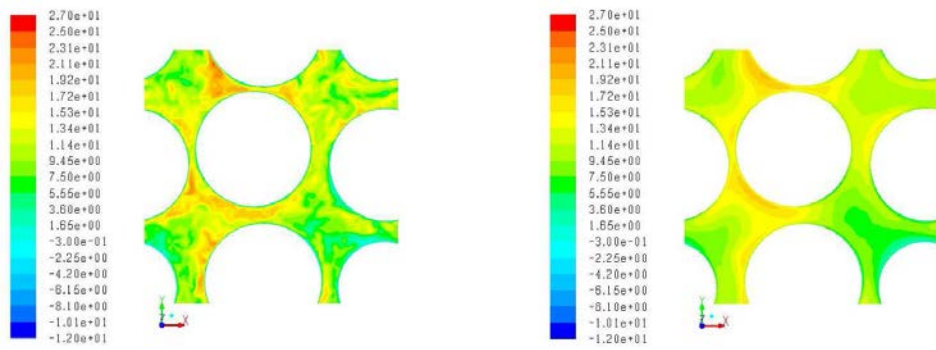
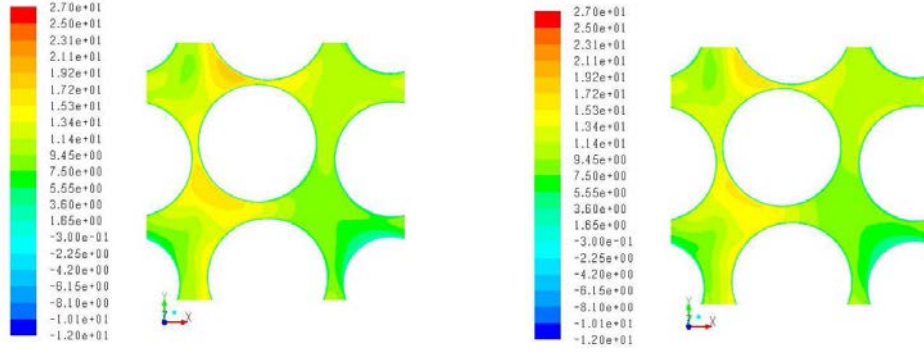
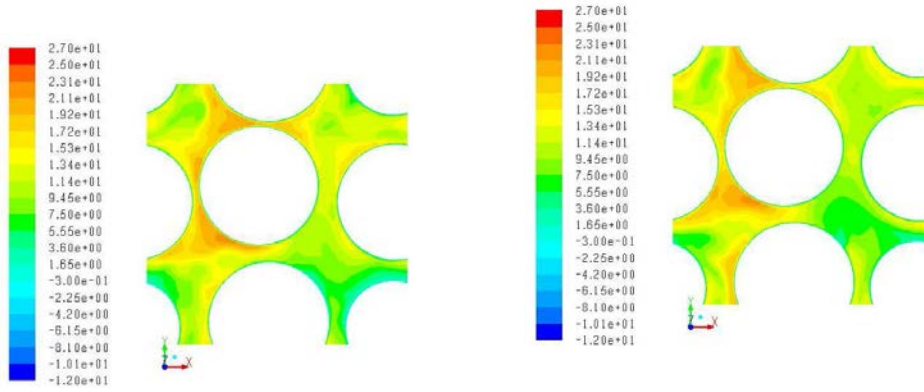


FIGURE B.6 – Champ de vitesse obtenu par le modèle LES. $Re_p \approx 4800$. Gauche : champ de vitesse instantanée u_z , droite : champ de vitesse RANS, $\bar{u}_z$.



(a) Champ de vitesse obtenu par le modèle bas Reynolds $k - \epsilon$ (b) Champ de vitesse obtenu par le modèle haut Reynolds Realizable $k - \epsilon$



(c) Champ de vitesse obtenu par le modèle bas Reynolds Standard $k - \omega$ (d) Champ de vitesse obtenu par le modèle bas Reynolds Transition SST

FIGURE B.7 – Évaluation de la vitesse $\bar{u}_z$ par différents modèles RANS. $Re_p \approx 4800$.

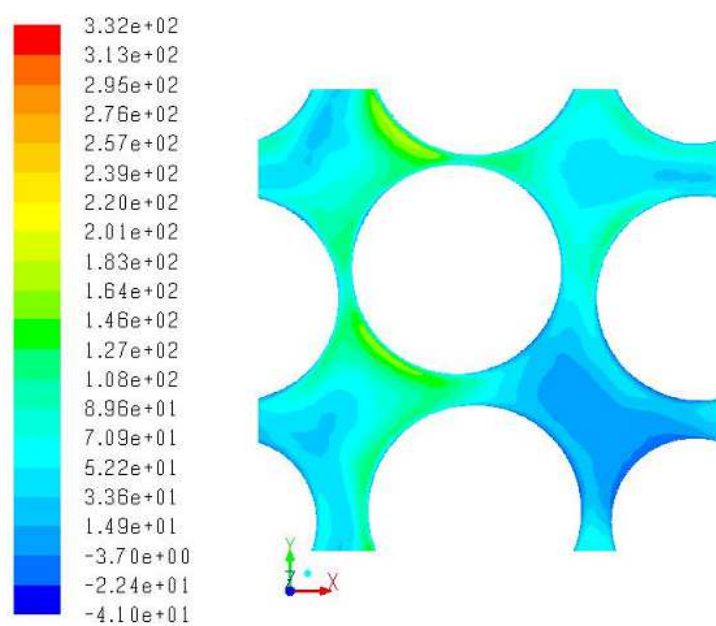
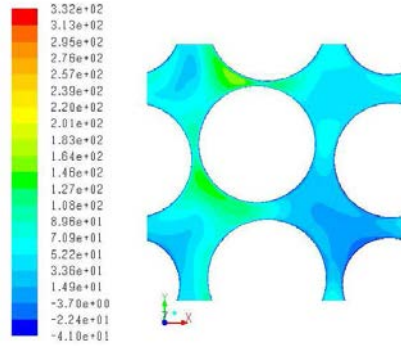
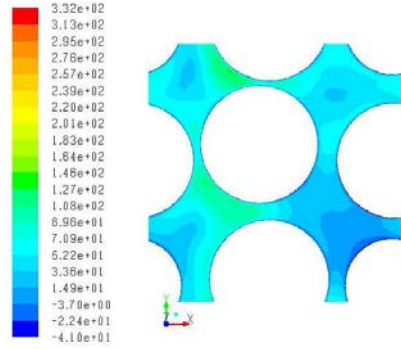


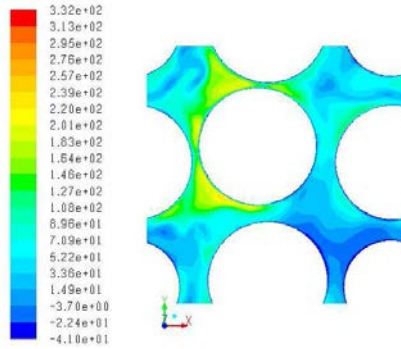
FIGURE B.8 – LES : Energie cinétique totale (turbulente et dispersive) $k_{RANS} + k_d$ à $Re_p \approx 4800$.



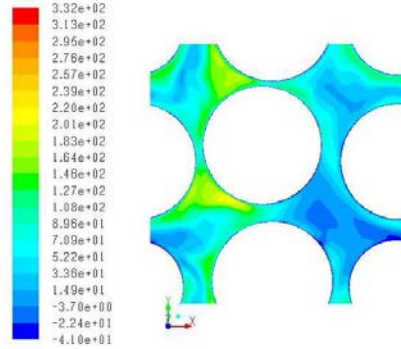
(a) Modèle bas Reynolds $k - \epsilon$



(b) Modèle haut Reynolds $k - \epsilon$



(c) Modèle bas Reynolds Standard $k - \omega$



(d) Modèle bas Reynolds Transition SST

FIGURE B.9 – Évaluation de l' énergie cinétique totale (turbulente et dispersive) $k_{RANS} + k_d$ par différents modèles RANS. $Re_p \approx 4800$.

B.4 Conclusion

On peut premièrement noter que dans ce type de milieu, les modèles RANS $k - \epsilon$ semblent sous évaluer les fluctuations. De plus l'erreur faite sur l'évaluation de l'énergie cinétique (moments d'ordre deux) peut être très importante comparée à celle qui peut être faite sur la vitesse (moment d'ordre 0). Le modèle haut Reynolds $k - \epsilon$ semble être le moins adapté pour ce type de milieu. Le modèle $k - \epsilon$ bas Reynolds semble être adapté pour estimer avec satisfaction les moments d'ordre 0. Si à l'échelle locale le modèle bas Reynolds retrouve au moins qualitativement la répartition spatiale des fluctuations, il sous estime sévèrement leur intensité à l'échelle macroscopique. Les modèles $k - \omega$ semblent quant à eux surestimer les fluctuations d'ordre deux à l'échelle locale (les extrema) mais donnent satisfaction à l'échelle macroscopique.

Bien que le modèle $k - \epsilon$ haut Reynolds est le moins adapté c'est cependant ce modèle qui sera choisi pour effectuer les calculs de référence. En effet, le modèle $k - \epsilon$ bas Reynolds requière un maillage très raffiné à la paroi mais n'améliore que très faiblement l'estimation des moments d'ordre deux. Quant aux modèles $k - \omega$, ils requièrent premièrement un maillage très raffiné près des parois ($y^+ < 5$) et sont peu utilisés pour étudier des écoulements en milieu poreux. De plus, ces modèles semblent retrouver correctement l'intensité des fluctuations d'ordre deux à l'échelle macroscopique que par un effet compensateur de la moyenne volumique. Si la géométrie étudiée ici est représentative d'un milieu poreux isotrope, il n'est pas certain que cet effet compensateur soit aussi efficace pour les systèmes que nous étudions et qui sont inhomogènes et anisotropes.

Annexe C

Modèle radial 1D

Pseudo-homogeneous 1D RANS radial model for heat transfer in tubular packed beds

I. Thiagalingam^{a,b,*}, P. Sagaut^c

^a*Institut Jean-Le-Rond d'Alembert, Université Pierre et Marie Curie - Paris 6, UMR 7190,
4 place Jussieu, case 162, F-75252 Paris Cedex 05, France*

^b*Paris Saclay Research Center-Air Liquide, 1 Chemin de la porte des Loges, Les loges en
Josas, BP 126, 78 354 Jouy-en-Josas, France*

^c*Aix-Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, M2P2 UMR 7340, 13451 Marseille,
France*

Abstract

A RANS zonal pseudo-homogeneous 1D radial heat transfer model is derived using an homogenization technique along with high-fidelity microscopic simulation to calibrate the model free parameters. Thus, it is brought to light the importance of the mechanical dispersion in the mixing process, the similarity between turbulent and dispersive dynamics, the existence of a near wall zone characterized by a channeling effect which is responsible for the thermal resistance over the zone. A linear law for the effective thermal conductivity is proposed to assess the heat transfer within the disrupted thermal boundary layer. The model showed its ability to estimate the effective conductivity and the temperature field in the radial direction with satisfaction. Very good agreements are also found in the near wall zone where the temperature gradients are the highest. The model well estimated also the value of the wall temperature and the wall heat transfer coefficient for an imposed heat flux at the wall.

Keywords: Packed bed, turbulence, wall temperature, dispersion, porous medium, up-scaling, CFD, heat transfer, boundary layer

*Corresponding author

Email address: ilango.thiagalingam@gmail.com (I. Thiagalingam)

1. Introduction

Packed beds with low tube-to-particle diameters ratio are widely used in chemical engineering, e.g. in steam methane reforming processes for Hydrogen production. The heat transfer problem is intensively investigated in such systems as the local temperature drives directly the efficiency of the catalytic reactions occurring on the solid particles' surface. The accurate prediction of the radial temperature profile from the tube wall to the middle of the bed is an important step towards the reliable assessment of reaction rates along the packed bed. Another critical point justifying the development of radial heat transfer models is the wall temperature assessment. Indeed, the near wall region faces strong thermal resistances as shown by the high temperature gradient profiles over this region [1]. Accurate heat control is then required near the wall as in the operating conditions a difference of 20 K at the tube wall can divide its life time by two or more.

For high ratio between tube and particles diameters ($N \gg 10$), the radial packing configuration is almost homogeneous as the wall induced inhomogeneity is confined in the very near vicinity of the tube. Hence, one can assume that both the axial velocity U_z and the effective thermal conductivity λ_r are constant in the radial direction and the extra near wall resistance can be lumped in a wall heat transfer coefficient h_w . These are the main hypotheses of the extensively used classical pseudo-homogeneous two dimensional plug flow heat transfer model commonly referred to as the $\lambda_r - h_w$ model [2].

However, discrepancies between literature correlations for λ_r [3] and namely for h_w [4] highlight that the assumed hypotheses have no more validity for relatively low tube-particle diameters ratio ($N < 10$) packed beds. Moreover, experimental measurements [5] and recent CFD simulations of fixed bed reactors [6] highlight an oscillating profile of the radial void which smoothly decreases with the distance from the wall. However, near wall profile displays a steep decrease from the wall (where the void is equal to one) up to a distance of $d_p/2$, where d_p is the particle diameter. The velocity profile which is linked to

the porosity profile displays the same features [6, 7]. The wall heat transfer coefficient which is a sort of a boundary condition is no more suitable for an extended wall zone (its width is not negligible compared to the bulk zone). For a comprehensive review on radial heat transfer problem, see [8].

35 An alternative model to the $\lambda_r - h_w$ model [9, 10, 11, 12, 13], which is able to dispense with the apparent wall heat transfer coefficient h_w has been first proposed by [14]. It consists of deriving a bed effective conductivity which depends on the radial position. It was thus highlighted that the effective thermal conductivity $\lambda_r(r)$ is sharply damped in the vicinity of the wall [15]. From this
40 observation, numerous two-layer models were developed [16, 17, 18, 19, 13] to distinguish the near wall zone heat transfers from the bulk ones. However, deep insights into the physical mechanisms were lacking among those models. Then, Borkink et al. [20] bring to light the existing link between the near wall channeling effect and the thermal resistance showing that the near wall particular
45 packing configuration is responsible for the conductivity damping in the vicinity of the wall. More realistic models were then proposed by authors [21]. For instance, Lerou et al. and Marivoet et al. [22, 23] resolved the energy conservation equation with a void profile depending on the radial position and a velocity profile calculated with the Brinkman-Darcy-Forchheimer (BDF, [24]) model. It was
50 shown that models taking into account both the radial inhomogeneity and the flow dynamic improve significantly the temperature profile prediction [12, 25].

The aim of this paper is to derive a new pseudo-homogeneous 1D radial model for the heat transfer in low-N packed beds, using the high-fidelity microscopic CFD solutions. The porous medium framework is used to up-scale
55 unequivocally pore scale relevant data obtained via high-fidelity 3D simulations to the reactor scale. This is practically achieved extending the concept of Representative Elementary Volume (REV) to anisotropic wall bounded porous medium. Afterwards, turbulent flow governing pseudo-homogeneous equations including mechanical dispersion are derived and validated against 3D detailed
60 numerical simulations. Then, the flow features are used to describe the thermal mixing and derive the radial effective convective conductivity called for the 1D

radial pseudo-homogeneous heat transfer model development. Both wall temperature and the bed temperature profile are finally validated over the reference data obtained performing 3D fine simulations at the pore scale.

65 2. 3D high-fidelity numerical simulations of turbulent flow and heat transfers at the pore scale in packed beds

2.1. Packing/meshing step

A tubular random and periodic packing configuration with spheres is considered (Fig.2). The ratio between tube and particle diameters (respectively d_t and d_p) is taken equal to 10 ($N = d_t/d_p = 10$). The domain is composed of 835 particles and the average porosity is equal to $\phi_{moy} = 0.443$ (see Table 1). The packing is generated thanks to the commercial algorithm *DigiPacTM* which has demonstrated its capability to generate reliable and realistic tubular packings mainly for spherical particles [26, 27, 28, 29]. The packing is considered to be
75 homogeneous in the axial (Fig.3) and azimuthal directions but presenting radial inhomogeneity (Fig.4).

During the mesh generation step, one has to face high skewed cells generated in the regions surrounding particle-particle or particle-tube contact points. Moreover, the distribution of pore size is quite large as far as random packings
80 are concerned. Thus, very narrow gaps can also be found which is another source of low quality cells. To preclude convergence problems in CFD simulations, one can slightly modify the packing configuration [30, 31, 32, 33, 6, 34, 35]. Local modifications of the geometry are recommended against global modifications. Indeed, global modifications can lead errors on porosity and so on the pressure
85 drop of 4% and 12 – 15% respectively [36]. The strategy employed here [37] consists in first detecting particles one close to another with a distance less than 1% of d_p . For those particles, radius is then increased by 2% of d_p . The overlapping part are removed and the increased particles take then back their original size. A minimal gap between particles is thus guaranteed (Fig.1). The
90 same approach is applied for the particle-tube contact points or narrow gaps.

The tube radius is decreased by 2% of d_p and parts of particles laying outside of the new cylinder are removed. The tube takes then back its original dimensions.

2.2. Computational Fluid Dynamics (CFD) model setup

The fluid domain is meshed with tetrahedral elements and numerical simulations are performed with the commercial solver ANSYS Fluent 13.0. Periodic boundary conditions are set at the inlet/outlet faces imposing a mass flow. Particles are assumed to be adiabatic and a constant heat flux is set on the tube wall. The Reynolds Averaged Navier-Stokes and energy equations are solved to get flow and temperature fields in the fluid domain. The turbulence dynamic is described with the two-equation $k - \epsilon$ model. The enhanced wall treatment which combines a two-layer model with an enhanced wall law is set to capture the near wall dynamic: when the mesh is fine enough ($y^+ \approx 1$), the viscous affected region is solved by the two-layer model and when the mesh is coarse, a wall law is rather used (see ANSYS Documentation for further details). The near wall treatment used here is much more suited for complex wall flow encountered in packed bed than a standard wall law. Indeed, the y^+ values are spread over a wide range as they depend directly on both the local mesh size and the local flow configuration (recirculating, squeezed, downward, accelerated or stagnant flow).

As for the numerical discretization, the first order upwind scheme is used to solve momentum, energy and turbulence equations. The standard scheme is used to solve the pressure and the pressure-velocity coupling is realized with the SIMPLE scheme.

Mesh convergence study is achieved for REV-averaged quantities (up-scaled quantities, see section 3). Radial profiles of a certain number of the REV-averaged quantities are depicted on Figs. 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11 for different mesh densities. One can observe that a satisfactory convergence is obtained on all quantities of interest for the present study.

Particle Shape	Number of particles	N	ϕ_{moy}
Spherical	835	10	0.443

Table 1: Main characteristics of the present packed bed.

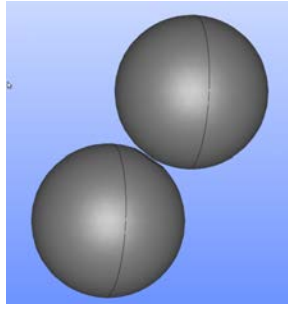


Figure 1: Contact points locally handled by creating a small gap between particles.

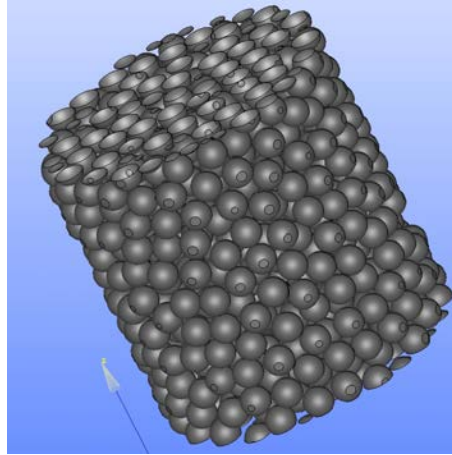


Figure 2: Periodic random packing of spherical particles.

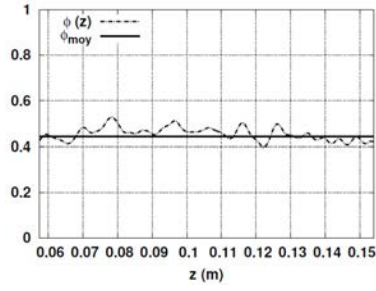


Figure 3: Axial porosity.

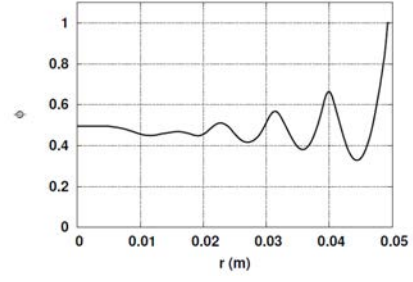


Figure 4: Radial porosity.

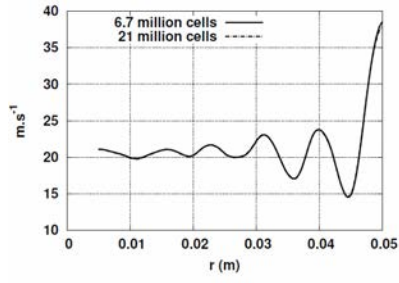


Figure 5: Radial profile of $\langle \bar{u}_z \rangle^i$ for different mesh densities.

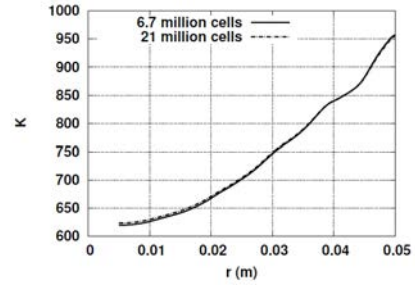


Figure 6: Radial profile of $\langle \bar{T} \rangle^i$ for different mesh densities.

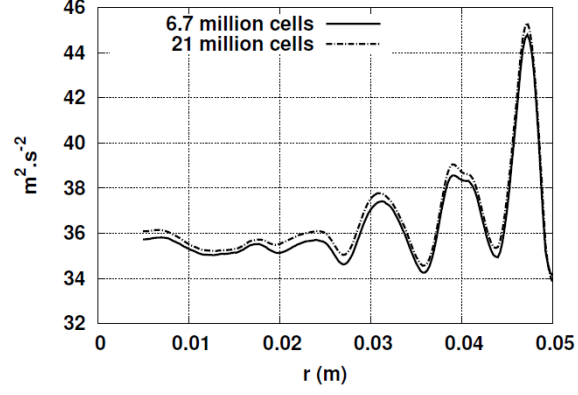


Figure 7: Radial profile of REV-averaged turbulent kinetic energy $\langle k \rangle^i$ for different mesh densities.

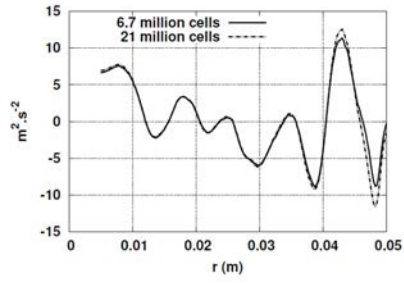


Figure 8: Radial profile of $\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i$ for different mesh densities.

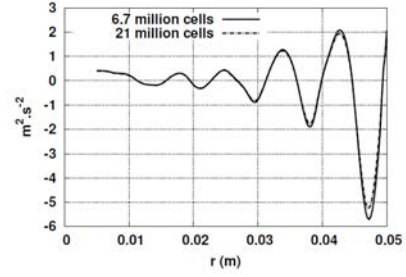


Figure 9: Radial profile of $\overline{\langle u'_z u'_r \rangle}^i$ for different mesh densities.

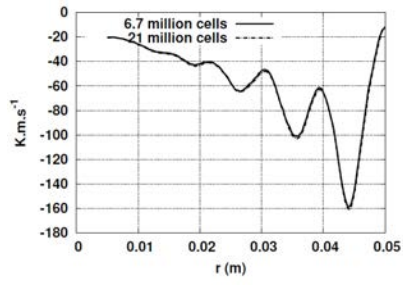


Figure 10: Radial profile of $\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{T} \rangle^i$ for different mesh densities.

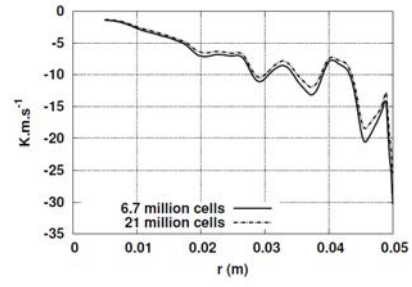


Figure 11: Radial profile of $\langle \overline{T' u_r'} \rangle^i$ for different mesh densities.

3. Extension of the volume averaging concept to wall bounded anisotropic and inhomogeneous medium

120

The volume averaging concept is first recalled and its applications to periodic then to isotropic infinite porous medium are briefly reviewed. Finally, an extension of the representative elementary volume concept to wall bounded, anisotropic and inhomogeneous medium is presented and the defined set of criteria are validated over numerical simulations.

125

3.1. Volume averaging concept

In order to derive macroscopic governing equations for a turbulent flow in porous media, both time and spatial averaging operators are applied to instantaneous mass, momentum and energy conservation equations. The averaging operators split instantaneous quantity into two parts: the mean quantity and its fluctuation [38]. Hence the time decomposition reads,

$$\varphi = \bar{\varphi} + \varphi', \quad (1)$$

where $\bar{\varphi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \varphi dt$ is the time averaged quantity and φ' the time fluctuation around the mean quantity. Following the same reasoning for the spatial averaging operator, one can write

$$\varphi = \langle \varphi \rangle^i + \delta\varphi, \quad (2)$$

where $\langle \varphi \rangle^i$ is the intrinsic average of φ in the fluid and $\delta\varphi$ the spatial deviation. According to the scale separation's assumption between microscopic and macroscopic quantities, one can obtain $\langle \delta\varphi \rangle^i = \bar{\varphi}' = 0$. The volume averaged quantity reads,

$$\langle \varphi \rangle^v = \frac{1}{V} \int_V \varphi dV, \quad (3)$$

where V is a volume in which the average is carried out. It is also referred to as the REV, the *Representative Elementary Volume*. It can be showed [38] that these two averaging operators permute $\langle \bar{\varphi} \rangle^i = \overline{\langle \varphi \rangle^i}$. When the porous

medium is saturated by the fluid, one can link the intrinsic average and the volume average by the following expression :

$$\langle \varphi \rangle^v = \phi \langle \varphi \rangle^i, \quad (4)$$

where $\phi = \frac{V_f}{V}$, denotes the porosity. While applying the space averaging operators to flow governing equations for instance, one needs to permute derivatives and averaging operators. It is showed from [39],

$$\langle \nabla \varphi \rangle^v = \nabla \langle \varphi \rangle^v + \frac{1}{V} \int_A \mathbf{n} \varphi dA, \quad (5)$$

and

$$\langle \nabla \cdot \boldsymbol{\varphi} \rangle^v = \nabla \cdot \langle \boldsymbol{\varphi} \rangle^v + \frac{1}{V} \int_A \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\varphi} dA \quad (6)$$

with dA an element of solid surface, $\mathbf{n}$ the normal vector directed from the solid phase toward the fluid phase and A the solid surface.

3.2. Representative Elementary Volume for ordered and disordered infinite porous media [40, 41]

The Representative Elementary Volume (REV) is a fundamental notion as far as porous medium is concerned. The idea behind the concept is that the averaged geometric configuration and effective properties of the entire infinite medium can be statistically deduced from a well defined volume much smaller than the considered one. This leads to a scale separation between effective (macro-scale) and detailed (micro-scale) properties of the medium. Thus, momentum and energy conservation equations are solved within the REV (micro-scale simulations) to get effective properties of the medium and a new set of equations are derived for the REV-filtered effective medium (macro-scale simulations) by applying the volume averaging operator to micro-scale equations and using simulations carried out in the REV to model sub-filter terms [42, 43].

For an infinite ordered medium as for instance periodic rows of solid objects, a single pattern can be considered as the elementary representative volume of the medium. As far as isotropic disordered medium is concerned, the elementary

representative volume has to be wide enough to contain within it as many different configurations as needed to be statistically representative of the medium. This leads to the following constraint that requires the characteristic length of the elementary representative volume l_{REV} to be wider than both pore l_p and particle l_d length scales.

$$l_{REV} \gg \text{MAX}\{l_p, l_d\} \quad (7)$$

3.3. Representative Elementary Volume for packed bed configurations [37]

The periodic packing can be considered homogeneous in both axial (see Fig. 3) and azimuthal directions. The radial inhomogeneity induced by the presence of the wall is revealed by a huge drop of the void from the wall up to a distance of $d_p/2$ followed by an oscillating void profile which is slowly damped when moving away from the container wall (see Fig.4). To be statistically meaningful, the REV has to be large enough to encompass as many different particles configurations as necessary to represent the considered medium at any radial position. At the same time, the REV's size in the wall normal direction is to be smaller than the characteristic length of the inhomogeneity l_{ih} but larger than the pore length scale l_p . A tubular REV is consistent with the above constraints. The length L of such a REV can be extended to meet the statistical convergence in the axial direction as the packing is assumed to be homogeneous in this direction and the thickness d of the tubular REV can be shrunk to be small enough to capture the inhomogeneity in the radial direction (see Fig. 12). At the center of the tube, the REV is cylindrical.

$$l_p \leq d(r) \leq l_{ih} \quad \forall r \quad (8)$$

$$L(r) \gg \text{MAX}\{l_p, l_d\} \quad \forall r \quad (9)$$

Along this an additional constraint is necessary to keep the REV volume constant.

$$V_0 = 2\pi \cdot r \cdot d(r) \cdot L \quad (10)$$

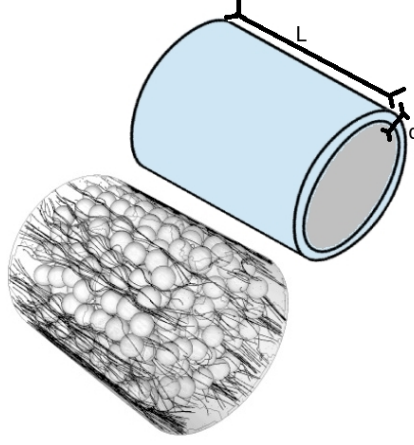


Figure 12: A statistically meaningful REV for realistic packed bed

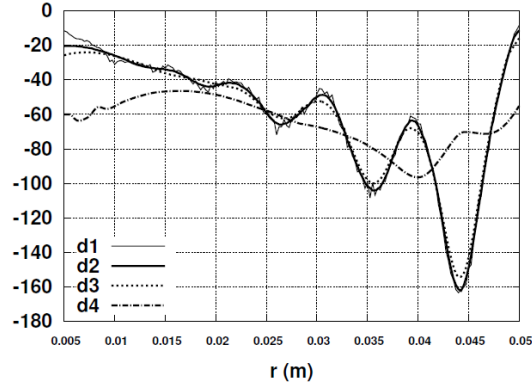


Figure 13: Radial profile of the REV-averaged dispersive thermal-velocity fluctuations $\langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{T} \rangle^i (m.K.s^{-1})$ for different REV thicknesses $d1 < d2 < d3 < d4$.

To show that the chosen L and d are meaningful in practical applications, a REV convergence study is carried out. Tacking different size for d , one can assume that the REV thickness is consistent with the constraints (8), as soon as the obtained profile do not contains pore scale fluctuations but matches with the representative profile of the pore scale dynamic. On the figure 13, the profile

L_i to L_{i+1} (m)	ϕ	$\langle \bar{u}_z \rangle^i$	$\langle \bar{T} \rangle^i$	$\langle k \rangle^i$	$\langle \epsilon \rangle^i$
0.005 to 0.01	5.4%	4.2%	5.1%	1.2%	1.9%
0.01 to 0.02	3.3%	3.0%	11.5%	1.6%	3.6%
0.02 to 0.03	3.3%	2.6%	4.7%	1.3%	2.4%
0.03 to 0.04	2.5%	2.2%	4.0%	1.7%	3.9%
0.04 to 0.05	2.5%	1.5%	2.1%	1.1%	1.6%
0.05 to 0.06	1.4%	0.9%	2.8%	0.6%	1.0%
0.06 to 0.07	1.0%	0.7%	1.4%	1.2%	2.5%
0.07 to 0.08	1.2%	1.1%	1.4%	2.1%	4.9%
0.08 to 0.09	1.1%	0.7%	1.1%	1.8%	4.2%
0.09 to 0.1	0.9%	0.7%	0.9%	1.3%	3.4%

Table 2: Error on the radial profile of REV-averaged quantities when the tube length L is successively increased.

obtained with the thickness $d2$ fulfills the constraints (8). Indeed, the thickness $d1$ reaches the pore scale as reveal the high frequency fluctuations around the mean profile whereas $d3$ and $d4$ are above the characteristic length scale of the inhomogeneity (they do not match the profile obtained with the thickness $d1$). As for L , the constraint (9) is achieved as soon as increasing L do not change qualitatively and quantitatively the mean quantity profile. In practice, it is difficult to reach a quantitatively converged mean quantity and it is assumed that the convergence is reached when the averaged error between consecutive increase of the tube length $L_{i+1} = L_i + \Delta L$ is below a convergence threshold (see tables 2 and 3). The error reported is computed as follows

$$Error(\psi) = \frac{1}{R} \int_0^R dr 100 \left| \frac{\langle \psi_{i+1} \rangle(r) - \langle \psi_i \rangle(r)}{\langle \psi_{i+1} \rangle(r)} \right| \quad (11)$$

with,

$$\langle \psi_i \rangle(r) = \frac{1}{V_i} \int_{V_i} \psi dV \quad V_i = 2\pi r \cdot L_i \cdot d2(r) \quad (12)$$

where $d2(r)$ is the thickness satisfying (8).

L_i to L_{i+1} (m)	$\langle u'_z u'_r \rangle^i$	$\langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{T} \rangle^i$	$\langle u'_r T' \rangle^i$
0.005 to 0.01	65.7%	281.5%	10.9%
0.01 to 0.02	47.8%	55.4%	11.4%
0.02 to 0.03	35.7%	37.4%	7.4%
0.03 to 0.04	24.6%	17.9%	4.2%
0.04 to 0.05	15.2%	13.6%	4.2%
0.05 to 0.06	64.2%	9.7%	3.7%
0.06 to 0.07	8.5%	11.4%	1.9%
0.07 to 0.08	15.6%	7.4%	2.4%
0.08 to 0.09	8.9%	5.4%	1.7%
0.09 to 0.10	8.3%	5.1%	1.5%

Table 3: Error on the radial profile of REV-averaged second order correlations when the tube length L is successively increased.

It is also worth noting that a large L is required to meet convergence with
160 a second order mean quantity such as for instance the REV-averaged Reynolds stress tensor components than with a zero order mean quantity such as the mean velocity. Hence, for a turbulent flow, the meaningful L is the one for which the second order mean quantities reach the convergence criterion.

3.4. Momentum and energy conservation at the macroscopic scale

Applying the volume averaging operator to the momentum and energy conservation equations at the pore scale one gets, after some algebra, at the macroscopic scale:

$$\nabla_j (\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i) = 0 \quad (13)$$

$$\begin{aligned}
& \nabla_j [-\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle \bar{u}_i \rangle^i + \nu \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] - \delta_{ij} \phi \frac{\langle \bar{P} \rangle^i}{\rho} \underbrace{-\phi \langle R_{ij} \rangle^i}_{\text{turbulent diffusion}} \underbrace{-\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i}_{\text{dispersion}}] \\
& + \underbrace{\frac{\nu}{V} \int \nabla_j \bar{u}_i n_j dS - \frac{1}{V\rho} \int P n_i dS}_{\text{viscous and pressure drag}} = 0
\end{aligned} \quad (14)$$

where $\overline{u'_i u'_j} = R_{ij}$.

$$0 = (\rho C_p)_f \frac{\partial}{\partial x_i} \left[-\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i \underbrace{-\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{T} \rangle^i}_{\text{dispersion}} \underbrace{-\phi \langle \overline{u'_i T'} \rangle^i}_{\text{turbulent diffusion}} \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left[(\lambda_f \phi) \frac{\partial}{\partial x_i} \langle \bar{T} \rangle^i + \underbrace{\frac{1}{V} \int n_i \lambda_f \delta \bar{T}_f ds}_{\text{tortuosity}} \right] \quad (15)$$

Both the second order moments and surface terms need a closure.

4. Macroscopic model for turbulent flow dynamic in packed beds

4.1. Turbulence in porous medium

Turbulence structures were observed by numerous experimental studies [44, 45, 46, 47] as soon as the Reynolds number based on pore size was above a few hundreds. The experimentally observed deviation of the flow dynamic to the Darcy law was thus attributed to the development of local turbulence [48]. Turbulence models were then developed at the macroscopic scale by applying volume averaging operator to Reynolds averaged Navier-Stokes equations (RANS) [42, 49, 50, 38].

A new concept was recently introduced by Teruel et al. [51, 52]. It consists in not distinguishing time fluctuations from the spatial ones but in considering fluctuations as the difference between the instantaneous quantity and the double averaged (time and space) quantity.

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) + \psi''(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) \quad (16)$$

with

$$\bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \left[\frac{1}{V_f} \int_{V_f} \psi dV \right] d\tau = \frac{1}{V_f} \int_{V_f} \left[\frac{1}{\Delta t} \int_{\Delta t} \psi d\tau \right] dV \quad (17)$$

and

$$\psi''(\mathbf{r}, \mathbf{x}, t) \cong 0, \quad \bar{\bar{\bar{\psi}}}(\mathbf{x}, t) \cong \bar{\bar{\psi}}(\mathbf{x}, t) \quad (18)$$

Thus, the total turbulent kinetic energy at the macroscopic scale becomes,

$$\begin{aligned}
 k_{Teruel} &= \frac{\overline{u_j'' u_j''}}{2} \\
 &= \frac{\langle u_j' u_j' \rangle^i}{2} + \frac{\langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i}{2} \\
 &= \langle k \rangle^i + \frac{\langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i}{2}
 \end{aligned} \tag{19}$$

It is made up of a turbulent part $\langle k \rangle^i$ and a dispersive part $\langle k_d \rangle^i = \frac{\langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{u}_j \rangle^i}{2}$.

180 The dispersion can be significant [53] and its contribution to the total kinetic energy is even above 60 – 70% [21] as far as packed beds are concerned (Figs. 14 and 15).

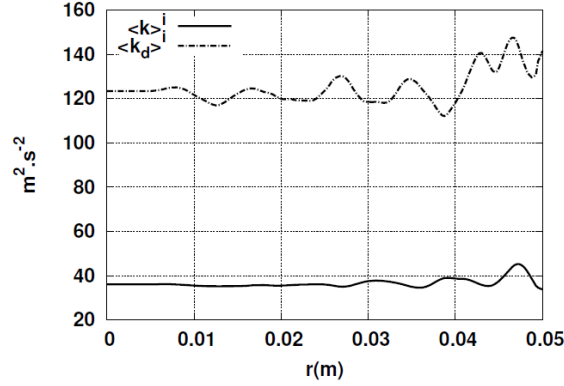


Figure 14: Radial profiles of the REV-averaged turbulent $\langle k \rangle^i$ and dispersive $\langle k_d \rangle^i$ kinetic energies in packed beds.

4.2. Macroscopic $\langle K \rangle^i - \langle \epsilon \rangle^i$ model

Following Teruel et al., a two equation model is derived at the macroscopic scale to describe the total turbulence. The total kinetic energy is defined as

$$\langle K \rangle^i = \langle k \rangle^i + \langle k_d \rangle^i \tag{20}$$

where $\langle k \rangle^i$ and $\langle k_d \rangle^i$ describe respectively the time and spatial fluctuations at the
185 macroscopic scale. The equation governing the total kinetic energy is obtained as

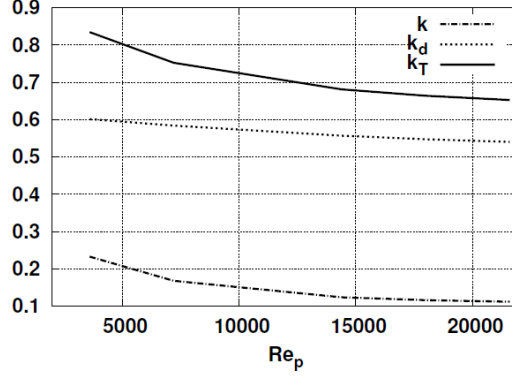


Figure 15: Evolution of the contribution of different kinetic energies with the Reynolds number. $k = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi \langle k \rangle^i}{U_s^2}$, $k_d = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi \langle k_d \rangle^i}{U_s^2}$ et $k_T = \frac{1}{R} \int_0^R dr \frac{\phi [\langle k \rangle^i + \langle k_d \rangle^i]}{U_s^2}$. U_s is the superficial velocity.

follows: First, the volume averaging operator is applied to the turbulent kinetic energy at the pore scale to up-scale it at the macroscopic scale (see Appendix A). The governing equation for the dispersive part is then obtained (see Appendix B) [54]. They are finally summed up to get the governing equation for the total fluctuations.

190

$$\begin{aligned}
0 = & -\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle K \rangle^i] + \nu \nabla_j^2 [\phi \langle K \rangle^i] - \phi [\langle R_{ij} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i \\
& - \nabla_j \left(\phi \left[\langle \frac{\bar{P}' u_j'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_j'} \rangle^i + \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_j \delta \bar{P} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \right] \right) - \phi \langle \epsilon \rangle^i - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i \\
& - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_j \delta k \rangle^i] + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k n_j dS + \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi [3 \langle k_d \rangle^i - \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] \\
& + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_i dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS \\
& - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] - \nu \nabla_j [\nabla_j \phi \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i
\end{aligned} \tag{21}$$

One can recognize on the right hand side the convection term, the molecular diffusion, the production term, the dynamic (turbulent and dispersive) diffusion and the energy destruction term, respectively. The other terms stem from the averaging operations and the radial inhomogeneity.

195 For configurations under consideration, one can show that the dispersive part of the dissipation rate ($\langle \epsilon_d \rangle^i = \nu \langle \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \frac{\partial \delta \bar{u}_j}{\partial x_j} \rangle^i$) is negligible (Fig. 16). Thus, $\langle \epsilon_T \rangle^i \approx \langle \epsilon \rangle^i$.

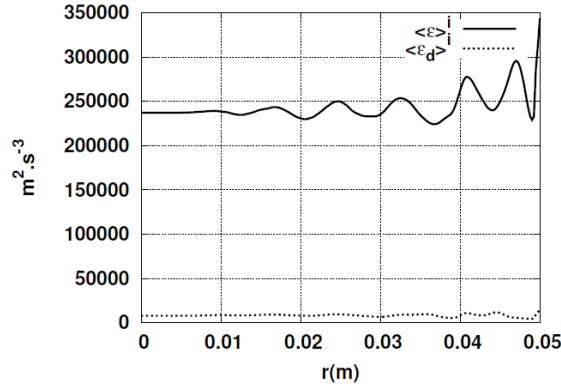


Figure 16: Radial profile of the turbulent ($\langle \epsilon \rangle^i$) and dispersive ($\langle \epsilon_d \rangle^i$) part of the total dissipation rate at the macroscopic scale.

The governing equation for the total dissipation rate becomes,

$$\begin{aligned}
0 = & -\nabla_j (\phi \langle \epsilon \rangle^i \langle \bar{u}_j \rangle^i) + \nabla_j \left[\left(\nu + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla_j (\phi \langle \epsilon \rangle^i) \right] - \frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j (\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i) \\
& - \frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} - \nabla_j (\phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_j \rangle^i) + \nabla_j \left(\frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_j dS \right) \\
& + \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_j \epsilon) n_j dS + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \nabla_j (\phi \langle \delta \nu_t \nabla_j \delta \epsilon \rangle^i) - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i \right. \\
& \left. + \langle \delta \epsilon \delta R_{ij} \rangle^i \nabla_j \langle \bar{u}_i \rangle^i + \langle R_{ij} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon (\nabla_j \delta \bar{u}_i) \rangle^i \right) - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i
\end{aligned} \tag{22}$$

4.3. Closure relations

Considering a fully developed flow which enables to neglect the axial macroscopic gradient ($\frac{\partial \langle \cdot \rangle^i}{\partial z}$), (14) can be rewritten in cylindrical coordinates,

$$0 = -\frac{\rho}{r} \nabla_r [r \phi \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{u}_z \rangle^i] - \nabla_z [\phi \langle \bar{P} \rangle^i] - \frac{\rho}{r} \nabla_r [r \phi \langle R_{zr} \rangle^i + r \phi \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{u}_z \rangle^i] + \mu \frac{1}{r} \nabla_r [r \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i)] + \frac{\mu}{V} \int \nabla_i \bar{u}_z n_i dS - \frac{1}{V} \int P n_z dS \quad (23)$$

with $i = z, r$. It can be numerically verified that the second order moments appearing in the macroscopic momentum conservation equation (23) can be linked to the velocity gradient thanks to a dynamic viscosity (Fig. 17).

$$-\phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{u}_z \rangle^i] = \langle \nu_T \rangle^i \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \quad (24)$$

where the dynamic viscosity reads,

$$\langle \nu_T \rangle^i = 0.09 \frac{\langle K \rangle^{i2}}{\langle \epsilon \rangle^i} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \times C_{m1} + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \times C_{m2} \right] \quad (25)$$

$\langle K \rangle^i$ is the total kinetic energy. It is worth noting that a near wall zone is identified with a thickness of $d_p/2$. The dynamic viscosity is lower in the vicinity of the wall than in the bulk zone and this property is captured thanks to the coefficients C_{m1} and C_{m2} .

The surface terms is then closed with a modified two-zonal Ergun law [55].

$$\frac{\mu}{V} \int \nabla_i \bar{u}_z n_i dS - \frac{1}{V} \int P n_z dS = - \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F1} + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F2} \right] \times \rho \frac{(1 - \phi)^{0.1}}{d_p \phi^5} [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i]^2 \quad (26)$$

In the following, the macroscopic equations are written in their superficial forms $(\psi)_s = \phi \langle \bar{\psi} \rangle^i$. Thus, the macroscopic Navier-Stokes equations reads,

$$\nabla_z [(u_z)_s] = 0 \quad (27)$$

$$0 = -\nabla_z (P)_s + \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left\{ \mu + \rho \langle \nu_T \rangle_s \right\} \nabla_r (u_z)_s \right] - h(\phi, d_p) (u_z)_s^2 \quad (28)$$

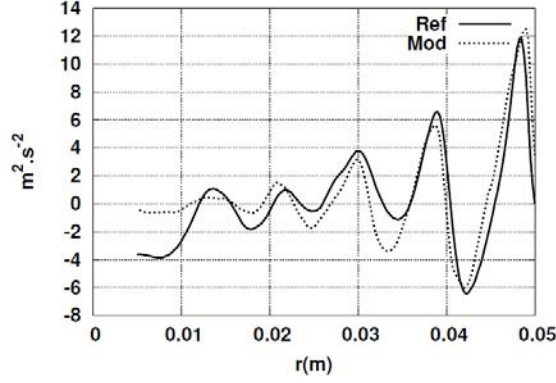


Figure 17: Radial profile of the second order moments (left hand side of (24)) denoted as "Ref" and the model based on the Boussinesq hypothesis (right hand side of (24)) denoted as "Mod". They are computed via 3D numerical simulations at the pore scale at $Re_p \approx 7800$ (Re_p is the Reynolds number based on the particle diameter and the superficial velocity).

with

$$(\nu_T)_s = 0.09 \frac{(K)_s^2}{(\epsilon)_s} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m1}}{\phi} + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \frac{C_{m2}}{\phi} \right] \quad (29)$$

and

$$h(\phi, d_p) = \rho \frac{(1 - \phi)^{0.1}}{d_p \phi^5} \times \left[\frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F1} + \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) C_{F2} \right] \quad (30)$$

The fully developed total kinetic energy equation in the cylindrical coordi-

nates reads,

$$\begin{aligned}
0 = & \frac{1}{r} \nabla_r (r \nu \nabla_r [\phi \langle K \rangle^i]) - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r \langle \bar{u}_z \rangle^i \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r \left(r \phi \left[\langle \frac{\bar{P}' u_r'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_r'} \rangle^i - \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{P} \rangle^i - \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i \right] \right) - \phi \langle \epsilon \rangle^i \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \bar{u}_r \delta k \rangle^i] + \frac{\nu}{V} \int \nabla_i k n_i dS \\
& + \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_z dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_z \rangle^i}{V} \int \nabla_i \delta \bar{u}_z n_i dS \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ir} \rangle^i] - \nu \frac{1}{r} \nabla_r [r \nabla_r \phi \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^{i2}}{2}] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i
\end{aligned} \tag{31}$$

with $i, j = z, r, \theta$. The production term is rewritten as,

$$\begin{aligned}
& - \phi [\langle R_{ir} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r \langle \bar{u}_i \rangle^i = - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \\
& - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] - \frac{\nabla_r \phi}{\phi} \langle \bar{u}_z \rangle^i \right] \\
& = (\nu_T)_s [\nabla_r (u_z)_s]^2 + (\nu_T)_s [\nabla_r (u_z)_s] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r (u_z)_s - \frac{\nabla_r \phi}{\phi^2} (u_z)_s \right]
\end{aligned} \tag{32}$$

and the flux terms can be clustered as

$$\begin{aligned}
& - \left(\phi \left[\langle \frac{\bar{P}' u_r'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_r'} \rangle^i - \frac{1}{\rho} \langle \delta \bar{u}_r \delta \bar{P} \rangle^i - \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_r \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_r \delta k \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ir} \rangle^i \right] \right. \\
& \left. + \nu \nabla_r \phi \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^{i2}}{2} \right) = \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_K} [\nabla_r (K)_s]
\end{aligned} \tag{33}$$

where the macroscopic turbulent Prandtl number σ_K is to be determined. The remaining terms are finally clustered as an effective production which includes sub-filter production and the inhomogeneous part of the macroscopic production.

$$\begin{aligned}
& \frac{\nu}{V} \int \nabla_i k n_i dS + \frac{\langle \bar{u}_z \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_z dS - \frac{\nu \langle \bar{u}_z \rangle^i}{V} \int \nabla_i \delta \bar{u}_z n_i dS + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \\
& + (\nu_T)_s [\nabla_r (u_z)_s] \times \left[\frac{1 - \phi}{\phi} \nabla_r (u_z)_s - \frac{\nabla_r \phi}{\phi^2} (u_z)_s \right] = f(\phi) (u_z)_s^3
\end{aligned} \tag{34}$$

where $f(\phi)$ is a function to be determined. The macroscopic governing equation for the total kinetic energy reads finally,

$$0 = \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_K} \right) \nabla_r (K)_s \right] + (\nu_T)_s [\nabla_r (u_z)_s]^2 + f(\phi) (u_z)_s^3 - (\epsilon)_s \tag{35}$$

The macroscopic dissipation rate equation becomes in cylindrical coordinates,

$$\begin{aligned}
0 = & \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla_r (\phi \langle \epsilon \rangle^i) \right] - \frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{zr} \rangle^i \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i - \frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} \\
& - \frac{1}{r} \nabla_r [r \phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_r \rangle^i] + \frac{1}{r} \nabla_r \left(r \frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_r dS \right) + \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_i \epsilon) n_i dS \\
& + \frac{1}{r \sigma_\epsilon} \nabla_r [r \phi \langle \delta \nu_t \nabla_r \delta \epsilon \rangle^i] - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i + \langle \delta \epsilon \delta R_{zr} \rangle^i \nabla_r \langle \bar{u}_z \rangle^i \right. \\
& \left. + \langle R_{ir} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_r \delta \bar{u}_i + \nabla_i \delta \bar{u}_r) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \right) - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i
\end{aligned} \tag{36}$$

with $i, j = z, r, \theta$. the production term can be rewritten as

$$\begin{aligned}
& - \frac{C_1}{\langle k \rangle^i} \langle R_{zr} \rangle^i \nabla_r (\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i) \langle \epsilon \rangle^i \approx - \phi [\langle R_{zr} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i] \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i \\
& + \phi \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i
\end{aligned} \tag{37}$$

The overall fluxes are clustered as

$$\begin{aligned}
& \left(\frac{\langle \nu_t \rangle^i}{\sigma_\epsilon} \nabla_r (\phi \langle \epsilon \rangle^i) - \phi \langle \delta \epsilon \delta \bar{u}_r \rangle^i + \frac{(\nu + \langle \nu_t \rangle^i / \sigma_\epsilon)}{V} \int \epsilon n_r dS \right. \\
& \left. + \frac{1}{\sigma_\epsilon} \phi \langle \delta \nu_t \nabla_r \delta \epsilon \rangle^i \right) = \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_{\epsilon K}} \left[\nabla_r (\epsilon)_s \right]
\end{aligned} \tag{38}$$

where $\sigma_{\epsilon K}$ is the Prandtl number associated to the macroscopic dissipation rate.

The destruction term becomes,

$$- \frac{C_2 \phi}{\langle k \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^{i2} - \frac{C_2}{\langle k \rangle^i} \phi \langle \delta \epsilon \delta \epsilon \rangle^i \approx - C_{\epsilon 2} \frac{(\epsilon)_s^2}{(K)_s} \tag{39}$$

The remaining terms are once again clustered as an effective production

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{V} \int \nu (\nabla_i \epsilon) n_i dS - \frac{C_1 \phi}{\langle k \rangle^i} \left(\langle \delta R_{ij} \nabla_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \langle \epsilon \rangle^i + \langle \delta \epsilon \delta R_{ir} \rangle^i \nabla_r \langle \bar{u}_i \rangle^i \right. \\
& \left. + \langle R_{ir} \rangle^i \langle \delta \epsilon (\nabla_r \delta \bar{u}_i + \nabla_i \delta \bar{u}_r) \rangle^i + \langle \delta R_{ij} \delta \epsilon \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \right) \\
& + \phi \langle \delta \bar{u}_z \delta \bar{u}_r \rangle^i \nabla_r [\phi \langle \bar{u}_z \rangle^i] \frac{C_{\epsilon 1}}{\langle K \rangle^i} \langle \epsilon \rangle^i = g(\phi, d_p) (u_z)_s^4
\end{aligned} \tag{40}$$

where $g(\phi, d_p)$, a function to be determined.

The governing equation describing the macroscopic dissipation rate reads then in its superficial form,

$$0 = \frac{1}{r} \nabla_r \left[r \left(\nu + \frac{(\nu_T)_s}{\sigma_{\epsilon K}} \right) \nabla_r (\epsilon)_s \right] + C_{\epsilon 1} \frac{(\epsilon)_s}{(K)_s} (\nu_T)_s \left[\nabla_r (u_z)_s \right]^2 + g(\phi, d_p) (u_z)_s^4 - C_{\epsilon 2} \frac{(\epsilon)_s^2}{(K)_s} \quad (41)$$

with $C_{\epsilon 1}$ and $C_{\epsilon 2}$ model coefficients to be determined.

205 4.4. model validation

The following expression is suggested to represent the radial void profile at the macroscopic scale (Fig.18).

$$\phi^*(r^*) = \begin{cases} 1 & \text{si } r^* = 0 \\ 0.465[1 + 1.1 \exp(-48r^{*2})] + 0.16 \exp(-0.2r^{*2}) \sin(2.46\pi r^*) & \text{sinon} \end{cases} \quad (42)$$

with $r^* = (R - r)/d_p$.

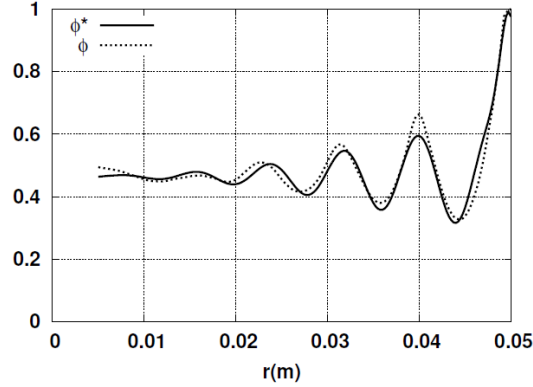


Figure 18: Validation of the suggested expression for the porosity profile (ϕ^*) against the porosity characterizing the reference system (ϕ).

Both the model coefficients and functions are obtained by optimizing the matching with the reference data. Hence, $C_{m1} = 0.444$, $C_{m2} = 0.05$, $\sigma_K = 1$,

$\sigma_{\epsilon K} = 1.3$, $C_{\epsilon 1} = 1.44$, $C_{\epsilon 2} = 1.92$. Then,

$$C_{F1}(Re_p) = \begin{cases} 0.26Re_p^{-0.14} - 0.02 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 0.046 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (43)$$

$$C_{F2}(Re_p) = \begin{cases} 5.5 \times 10^{-6}Re_p + 0.2 & 4000 \leq Re_p \leq 19500 \\ 0.1 & 19500 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (44)$$

$$\begin{aligned} f(\phi^*) &= \rho C_{K1}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)}{\phi^{*2}} \times \frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \\ &+ \left[\rho C_{K2}(Re_p) \phi^{*5} + \rho C_{K3}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)}{\phi^{*4}} \exp(-4(r - (R - d_p/2))/d_p) \right] \\ &\times \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \end{aligned} \quad (45)$$

with,

$$C_{K1}(Re_p) = \begin{cases} -0.78Re_p^{0.5} + 132 & 4000 \leq Re_p \leq 15600 \\ 38.41 & 15600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (46)$$

$$C_{K2}(Re_p) = \begin{cases} -8 \times 10^{-4}Re_p + 20 & 4000 \leq Re_p \leq 19600 \\ 5.6 & 19600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (47)$$

and

$$C_{K3}(Re_p) = \begin{cases} (5 \times 10^{-6}Re_p)^{-1} + 12 & 4000 \leq Re_p \leq 19600 \\ 23.11 & 19600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (48)$$

Finally,

$$\begin{aligned} g(\phi^*, d_p) &= \rho C_{E1}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)^{0.5}}{d_p^2 \phi^{*5}} \times \frac{1}{2} \left(1 - \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \\ &+ \rho C_{E2}(Re_p) \frac{(1 - \phi^*)^{0.4}}{d_p^2 \phi^{*8}} \times \frac{1}{2} \left(1 + \tanh[20(r - (R - d_p/2))/d_p] \right) \end{aligned} \quad (49)$$

with

$$C_{E1}(Re_p) = \begin{cases} -0.049Re_p^{0.26} + 0.66 & 4000 \leq Re_p \leq 15600 \\ 0.069 & 1560 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (50)$$

and

$$C_{E2}(Re_p) = \begin{cases} (0.01Re_p)^{-0.8} & 4000 \leq Re_p \leq 19600 \\ 0.016 & 19600 \leq Re_p \leq 31000 \end{cases} \quad (51)$$

One has to notice that all those coefficients tend towards a constant value at high Re_p (Fig. 19, 20, 21).

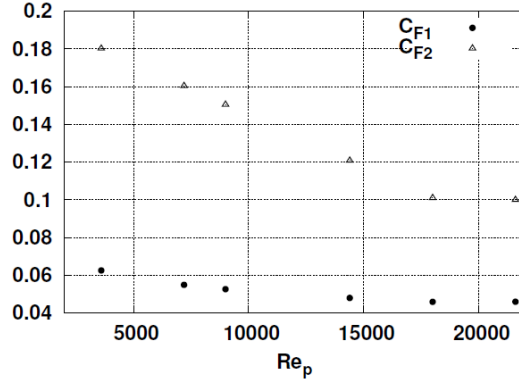


Figure 19: Reynolds dependence of C_{F1} and C_{F2} .

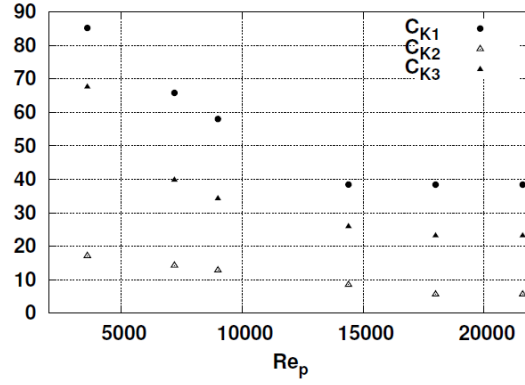


Figure 20: Reynolds dependence of C_{K1} , C_{K2} and C_{K3} .

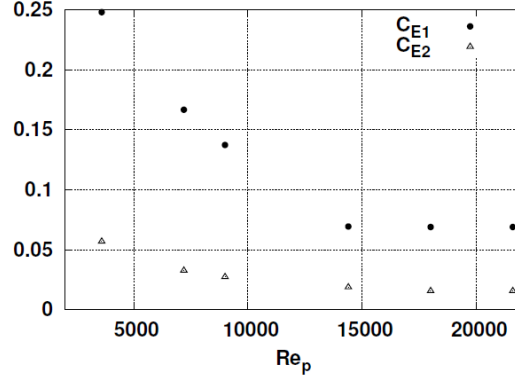
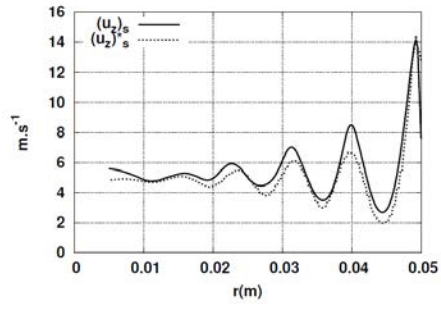


Figure 21: Reynolds dependence of C_{E1} and C_{E2}

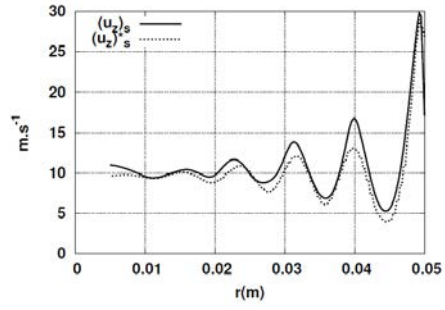
In the following, superscript * stands for quantities obtained performing
210 macro-scale simulations. Pressure drops evaluated with 3D simulations at the
pore scale and the ones assessed performing macroscopic simulations are re-
ported on the Table 4. Very good agreements are found between pore and bed
scale simulations. Radial profiles of the mean velocity, the total turbulent kinetic
energy and the macroscopic dissipation rate obtained performing macroscopic
215 simulations are validated against the up-scaled microscopic ones (Figs. 22, 23,
24). Indeed, the oscillating profile and the near wall maximum are quite well
recovered for all those quantities. It is particularly worth noting that the near
wall zone flow dynamic is well assessed.

Re_p	$\Delta P/\Delta L(Pascal/m)$	$(\Delta P)^*/\Delta L(Pascal/m)$	Error
2 000	-2272.8	-2148.9	5.45 %
4 000	-7841.1	-7582.1	3.30 %
7 800	-26668.3	-26829.5	0.6 %
15 600	-89880.4	-91042.5	1.3 %
19 600	-133767.5	-130105.8	2.7%
23 300	-185831.1	-186726.7	0.5 %

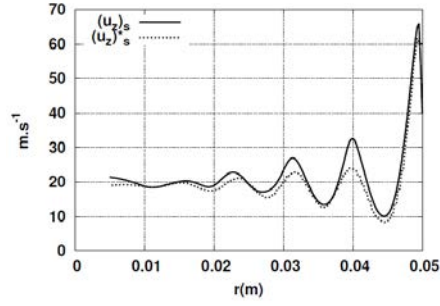
Table 4: Pressure drop evaluation. Micro($\Delta P/\Delta L$) vs. Macro ($(\Delta P)^*/\Delta L$)



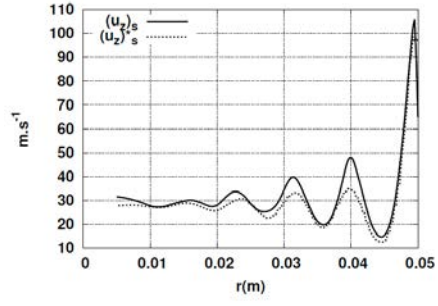
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

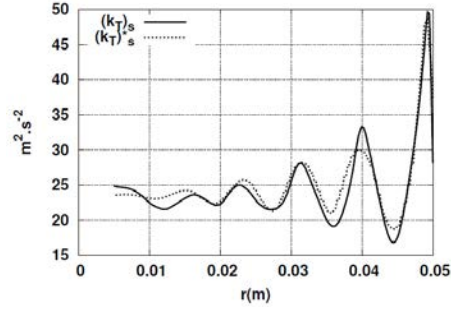


(c) $Re_p = 15600$

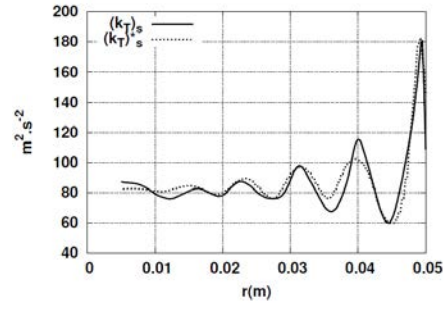


(d) $Re_p = 23300$

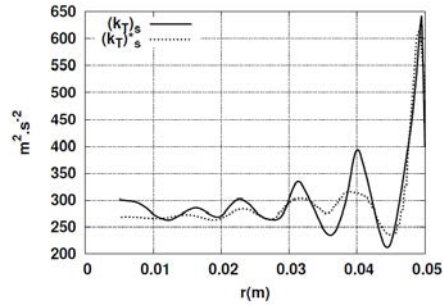
Figure 22: Radial profile of the mean velocity, Micro $(u_z)_s$ vs. Macro $(u_z)_s^*$.



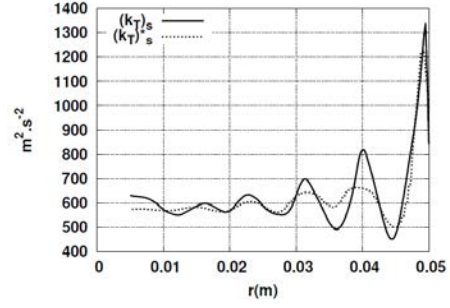
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

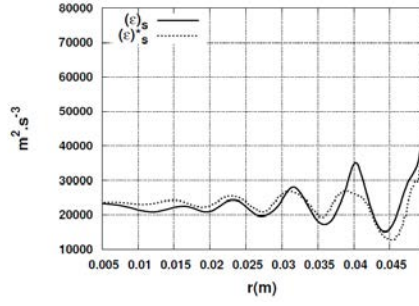


(c) $Re_p = 15600$

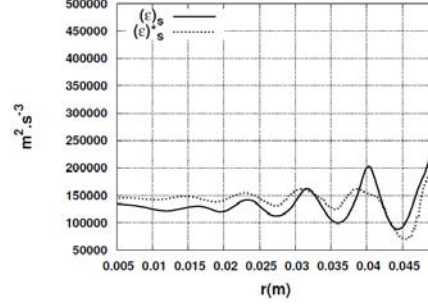


(d) $Re_p = 23300$

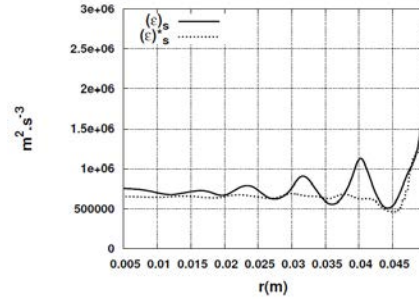
Figure 23: Radial profile of the total kinetic energy, Micro $(k)_s$ vs. Macro $(k)_s^*$.



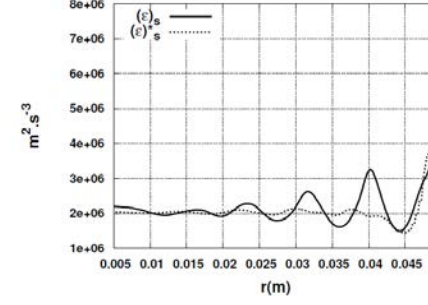
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$



(c) $Re_p = 15600$



(d) $Re_p = 23300$

Figure 24: Radial profile of the macroscopic dissipation rate, Micro $(\epsilon)_s$ vs. Macro $(\epsilon)_s^*$.

5. Pseudo-homogeneous 1D macroscopic radial model for heat transfer

5.1. Model of Mathey

The macroscopic equation governing the heat transfer (15) can be rewritten in cylindrical coordinates as,

$$(\rho C_p)_f \phi \langle \bar{u}_z \rangle^i \frac{\partial}{\partial z} \langle \bar{T} \rangle^i = -(\rho C_p)_f \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \phi \left[\langle \delta u_r \delta \bar{T} \rangle^i + \langle \bar{u}_r' \bar{T}' \rangle^i + \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i \right] \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[(\lambda_f \phi) \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i + \frac{1}{V} \int n_r \lambda_f \delta \bar{T}_f ds \right] \quad (52)$$

As far as packed bed configurations are concerned, the surface term which represents the tortuosity can be neglected compared to the turbulent and dispersive fluxes (Fig.25).

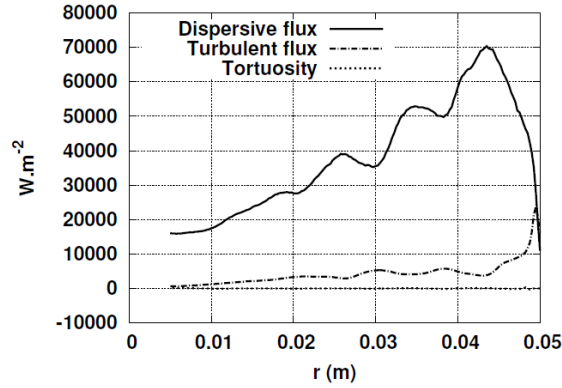


Figure 25: Radial profile of the tortuosity ($\frac{1}{V} \int n_r \lambda_f \delta \bar{T}_f ds$), turbulent flux ($-\phi(\rho C_p)_f \langle \bar{u}_r' \bar{T}' \rangle^i$) and dispersive flux ($-\phi(\rho C_p)_f \langle \delta u_r \delta \bar{T} \rangle^i$). $Re_p = 14400$.

The concept of Teruel et al.[51, 52] which consists of clustering dispersive and turbulent fluctuations was extended by Mathey [21] to heat transfer problems. Indeed, the second order terms appearing in the energy conservation equation

(52) were related to the temperature gradient through an effective conductivity depending on the radial position.

$$-(\rho C_p)_f \phi [\langle \overline{\delta u_r \delta T} \rangle^i + \langle \overline{u'_r T'} \rangle^i] = \lambda_{eff}(r) \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i \quad (53)$$

with,

$$\lambda_{eff} = \phi(\rho C_p)_f \frac{\langle \nu_T \rangle^i}{\sigma_t} \quad (54)$$

where σ_t is the macroscopic Prandtl number. The dynamic viscosity is defined as

$$\langle \nu_T \rangle^i = C_\mu \frac{\langle K \rangle^{i2}}{\langle \epsilon \rangle^i} \quad (55)$$

where $\langle K \rangle^i$ is the total kinetic energy (turbulence and dispersion are both included in it). With this approach, Mathey was able to derive a simple correlation for the medium effective conductivity [21],

$$\begin{aligned} \frac{\lambda_{eff}(r)}{\lambda_f} &= \phi(\rho C_p)_f \frac{\langle \nu_T \rangle_\infty^i}{\lambda_f \sigma_t} \\ &= \frac{C_k^2 C_\mu}{\sigma_t C_\epsilon} \frac{f_k^2(\phi(r))}{f_\epsilon(\phi(r))} Pr \cdot Re_p \end{aligned} \quad (56)$$

225 with Pr the molecular Prandtl number, Re_p the Reynolds number based on the superficial velocity and the particle diameter, C_k and C_ϵ are model constants which represent respectively the strength of the kinetic energy sub-filter production and the dissipation rate sub-filter production. $f_\epsilon(\phi(r))$ and $f_k(\phi(r))$ are functions depending on the porosity and damping to zero when getting closer to
230 the wall. The radial profile of the effective conductivity was hence successfully estimated particularly in the bulk zone [56]. The model proposed by Mathey is improved here by tacking into account the radial inhomogeneity and the near wall zone heat transfer.

5.2. The bulk zone: $r < R - d_p/2$

The effective convective conductivity in the radial direction is defined as

$$\lambda_{eff}(r) = -\rho_f \phi(C_p)_f \frac{\langle \overline{\delta u_r \delta T} \rangle^i + \langle \overline{u'_r T'} \rangle^i + \langle \bar{u}_r \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i}{\frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i} \quad (57)$$

The model proposed by Mathey [21] becomes,

$$(\lambda_{eff})_s = \rho_f (C_p)_f \frac{\phi(\nu_T)_s}{\sigma_{t1}(Re_p)} \left(1 - a_1(Re_p) R \nabla_r \phi\right) \quad (58)$$

with $(\nu_T)_s$ the dynamic viscosity defined in the previous section $(\nu_T)_s = 0.09 \frac{(K)_s^2}{(\epsilon)_s} \frac{C_{m1}}{\phi}$ (see equation (25)), ρ_f the fluid density, $(C_p)_f$ the fluid heat capacity, R the tube radius, $\sigma_{t1}(Re_p)$ the macroscopic Prandtl number and $a_1(Re_p)$ a Reynolds depending constant measuring the inhomogeneity effect. The porosity gradient is related to the solid surface distribution within the REV according to the following expression [39]

$$\nabla_i \phi = -\frac{1}{V} \int_S n_i dS \quad (59)$$

235 When the medium is homogeneous ($-\frac{1}{V} \int_S n_i dS = 0$), one gets $(\lambda_{eff})_s = \rho_f (C_p)_f \frac{\phi(\nu_T)_s}{\sigma_{t1b}(Re_p)}$.

5.3. The near wall zone: $R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10$

It was shown that the near wall zone is affected by a channeling effect. Indeed, the near wall dispersive mixing is reduced with the near wall void increase imposed by the packing configuration. Thus, even if the Reynolds number is locally increased, a significant part of the supplied heat at the wall is convected along the tube wall by the channeling effect. Therefore, the effective conductivity is weighted by the ratio between the total (turbulent and dispersive) mixing strength and the near wall channeling effect in order to assess the heat transfer efficiency in the near wall region.

$$(\lambda_{eff})_s = \rho_f (C_p)_f \frac{\phi(\nu_T)_s}{\sigma_{t2}(Re_p)} \left(1 - a_2(Re_p) R \nabla_r \phi\right) \times \left(\frac{\sqrt{(K)_s}}{(u_z)_s}\right)^\gamma \quad (60)$$

with γ a constant.

5.4. Heat transfer in the boundary layer: $R - d_p/10 \leq r < R$

In the viscous sublayer, the convective part is damped to zero and the effective conductivity is reduced to the molecular conductivity.

$$(\lambda_{eff})_s = \phi \lambda_f \quad r^+ < r_L^+ \quad (61)$$

240 with λ_f the fluid conductivity, $r^+ = (R-r)u_\tau/\nu$ wall distance expressed in wall unit and r_L^+ the viscous sublayer thickness of the macroscopic model.

For the range of Reynolds numbers considered in the study (operating conditions), the boundary layer zone $r_L^+ \nu/u_\tau \leq R-r < d_p/10$ includes both the logarithmic and buffer zones. The macroscopic energy conservation equation over the boundary layer zone can be simplified as

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r} \langle \bar{T} \rangle^i \right] = A \quad (62)$$

where A a constant assessing the boundary layer overall heat transfer in the axial direction.

We consider the case where the solid particles slightly disturb the thermal boundary layer. The temperature field can then be split up according to

$$\langle \bar{T} \rangle^i = \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \epsilon \langle \bar{T} \rangle^{i1} \quad (63)$$

with $\epsilon \ll 1$.

245 *0 order term in ϵ :*

The temperature field is assumed to be logarithmic over the considered zone in the absence of solid particles. Thus,

$$\begin{aligned} \frac{1}{d_p^2 (R/d_p - r^*)} \frac{\partial}{\partial r^*} (R/d_p - r^*) \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i0} \right] &= A \\ \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i0} \right] &= A \cdot d_p^2 \quad \text{as} \quad r^* \ll \frac{R}{d_p} \\ \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} [a \log(r^*) + b] \right] &= A^{(1)} r^* + B(Re_p) \\ \phi \lambda_{eff}(r^*) &= A^{(2)} r^{*2} + B^{(1)}(Re_p) r^* \\ \phi \lambda_{eff}(r^*) &\cong B^{(1)}(Re_p) r^* \quad \text{as} \quad r^* \ll 1 \end{aligned} \quad (64)$$

where $r^* = (R-r)/d_p$.

One can deduce that the effective conductivity is linear when the solid particles are considered to keep weak interactions with the wall boundary layer. It is consistent with the empirical correlation derived by [57]. The case of a strongly
250 disturbed boundary layer is discussed in Appendix C.

Finally, the effective conductivity in the entire medium reads,

$$\begin{aligned}
(\lambda_{eff})_s = & \begin{cases} \phi\lambda_f + \rho_f(C_p)f\frac{\phi^2(\nu_T)_s}{Pr\cdot K_1(Re_p)}(1 - a_1(Re_p)R\nabla_r\phi) & \text{for } r < R - d_p/2 \\ \phi\lambda_f + \rho_f(C_p)f\frac{\phi^2(\nu_T)_s}{Pr\cdot K_2(Re_p)}(1 - a_2(Re_p)R\nabla_r\phi) \times \left(\frac{\sqrt{(K)_s}}{(u_x)_s}\right)^\gamma & \text{for } R - d_p/2 \leq r < R - d_p/10 \\ \phi\lambda_f + \frac{\phi\lambda_f}{Pr}B^{(1)}(Re_p)\frac{R-r}{d_p} & \text{for } \frac{r_L^\perp\nu}{u_\tau} \leq R - r < d_p/10 \\ \phi\lambda_f & \text{for } R - r < r_L^\perp\nu/u_\tau \end{cases} \\
& (65)
\end{aligned}$$

Re_p	K_1	K_2	a_1	a_2	$B^{(1)}$
4 000	2.71×10^{-1}	3.81×10^{-2}	5×10^{-2}	6.25×10^{-2}	8.55×10^{-1}
7 800	2.85×10^{-1}	3.69×10^{-2}	5.26×10^{-2}	6.07×10^{-2}	1.71
15 600	3.61×10^{-1}	3.59×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.88×10^{-2}	2.56
19 500	3.61×10^{-1}	3.39×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.56×10^{-2}	2.56
23 300	3.61×10^{-1}	3.39×10^{-2}	6.67×10^{-2}	5.56×10^{-2}	2.56

Table 5: The macroscopic heat transfer coefficients values at different Reynolds numbers.

where $(\nu_T)_s$ is the dynamic viscosity defined by (29), the total kinetic energy $(K)_s$ and the axial velocity $(u_z)_s$ are obtained resolving the system of equations (27), (28), (35) and (41). Macroscopic thermal Prandtl numbers can be related
255 to the molecular Prandtl number Pr , $\sigma_{t1}(Re_p) = Pr \cdot K_1(Re_p)/\phi$ and $\sigma_{t2}(Re_p) = Pr \cdot K_2(Re_p)/\phi$ with $Pr = 0.72$ for the considered fluid. Finally, $\gamma = 0.5$ and $r_L^+ = 3$. The other coefficients values are reported in Table 5. It is worth noting that all coefficients tend to a constant value at high Reynolds, showing that the heat transfer mechanisms reach an equilibrium at high Reynolds.

260 5.5. Model validation

Macroscopic simulations are performed with the following boundary conditions: a constant heat flux at the wall, inlet and outlet boundaries are linked as periodic imposing a mass flow, then the overall heat flux brought at the tube wall is removed at the outlet $(\dot{m}C_p[T_{bulk,exit} - T_{bulk,inlet}])$. The near wall mesh
265 is fine enough to keep $y^+ \approx 1$.

The radial profile of the effective thermal conductivity is well recovered and very good agreements are found in the near wall region where the temperature gradients are huge (Fig. 26). Thus, the radial profile of the temperature field matches well with the up-scaled pore scale reference data (Fig. 27). The wall
270 temperature is also assessed with satisfaction (Table 6). The wall heat flux coefficient is then computed and very good agreements are found between the

Re_p	T_w micro (K)	T_w macro (K)	$ \Delta T_w $ (K)
4 000	1333.59	1334.724	1.134
7 800	1090.04	1091.4664	1.426
15 600	968.54	961.153	7.39
19 500	942.655	944.04	1.39
23 300	924.75	932.47	7.72

Table 6: Wall temperature, Micro vs. Macro.

1D macroscopic model and the REV-averaged 3D pore scale simulations (Tables 7 and 8).

From the simulation data a correlation for the wall heat transfer can be deduced (Fig. 28):

$$Nu_w = \frac{Qd_p}{\lambda_f(T_w - T_b)} = 0.1Re_p^{0.81} \quad (66)$$

with the bulk temperature $T_b = \frac{\int_0^R r \phi \langle \bar{u}_z \rangle^i \langle \bar{T} \rangle^i dr}{\int_0^R r \phi \langle \bar{u}_z \rangle^i dr}$.

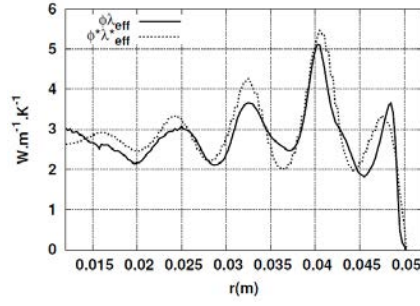
275 The correlation found in the present study agrees well with the correlations one can find in the literature. As it can be seen in the figure 29, the present correlation's trend and the range of the wall heat transfer coefficient values are consistent with those existing in the literature. Indeed, the slope given by the present correlation is very close to the one reported by [4]. It is worth noting
280 that correlations, except the one presented in the present study and the one derived in [58], consider the temperature jump between the wall temperature and the fluid temperature at the wall $T_w - T(r = R)$ ($Nu_w = \frac{Qd_p}{\lambda_f(T_w - T(r=R))}$). Consequently, the range of values for the wall heat transfer coefficient found in this study has to be compared to the correlation derived in [58]. One can thus
285 be satisfied by the agreement found between the two of them.

Re_p	T_b micro (K)	T_b macro (K)	$ \Delta T_b $ (K)
4 000	829.46	822.87	6.59
7 800	813.88	811.96	1.92
15 600	806.55	805.35	1.2
19 500	805.22	804.14	1.08
23 300	804.18	801.3	2.88

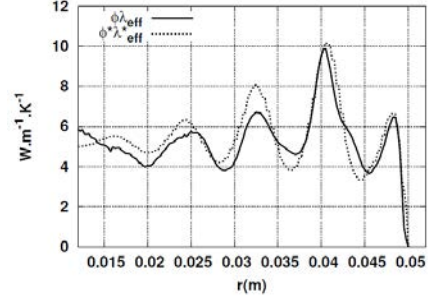
Table 7: Bulk temperature, Micro vs. Macro.

Re_p	Nu_w micro	Nu_w macro	$ \Delta Nu_w $
4 000	78.84	77.65	1.5%
7 600	143.92	142.2	1.2%
15 600	245.35	255.09	3.98%
19 500	289.18	284.09	1.76%
23 300	329.63	303	8.08%

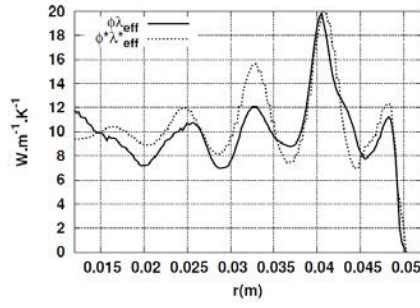
Table 8: Evaluation of the wall heat transfer coefficient $Nu_w = \frac{Qd_p}{\lambda_f(T_w - T_b)}$.



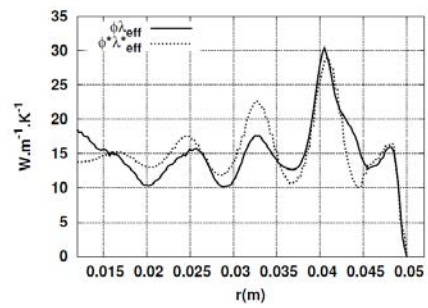
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$

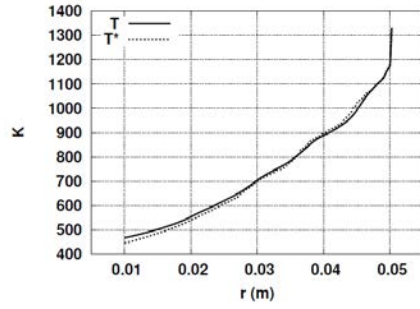


(c) $Re_p = 15600$

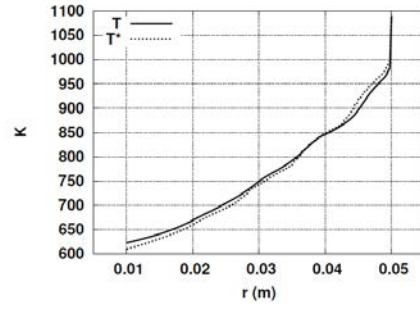


(d) $Re_p = 23300$

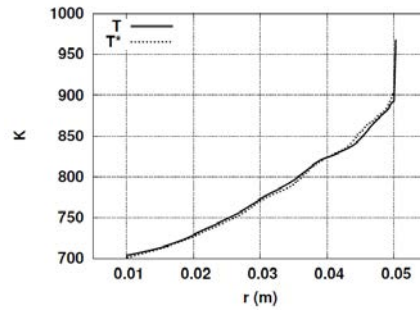
Figure 26: Radial profile of the effective thermal conductivity, Micro $\phi \lambda_{eff}$ vs. Macro $\phi^* \lambda_{eff}^*$.



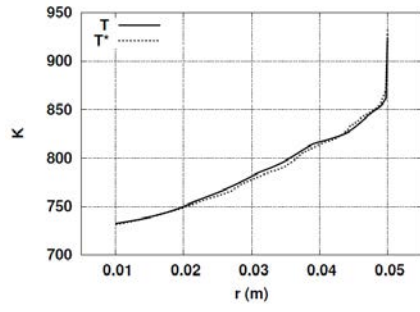
(a) $Re_p = 4000$



(b) $Re_p = 7800$



(c) $Re_p = 15600$



(d) $Re_p = 23300$

Figure 27: Radial profile of the temperature field at the macroscopic scale, Micro T vs Macro T^*

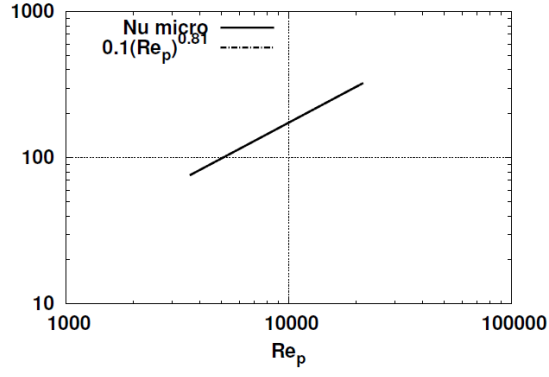


Figure 28: Correlation for the Nusselt number.

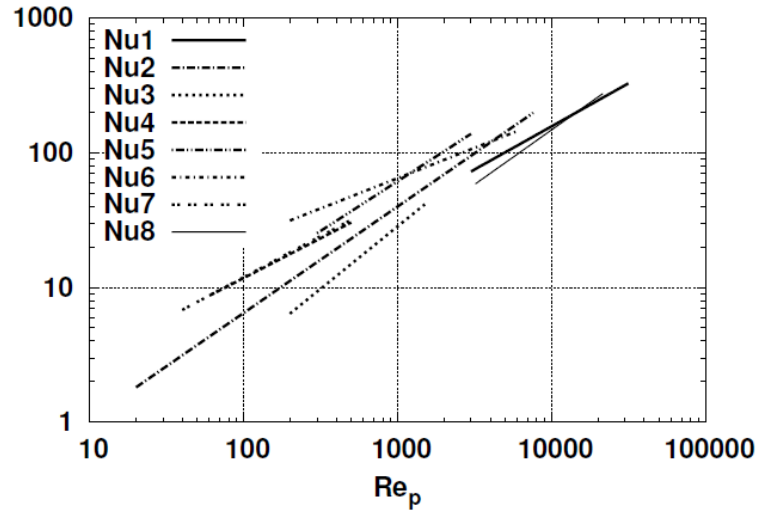


Figure 29: Correlations for the wall heat transfer coefficient. Nu1:[37]; Nu2: [4]; Nu3: [58]; Nu4: [59], Nu5: [60]; Nu6: [61]; Nu7: [62]; Nu8: Correlation derived in this study.

6. Conclusion

In the present study, a flow dynamic based two-zonal pseudo-homogeneous 1D radial heat transfer model is derived.

Indeed, a reference data describing the pore scale flow dynamic and heat
 290 transfers in packed bed systems is generated by tacking advantage of the CFD
 tools. A set of criteria is defined to enable the pore scale data's unequivocal
 up-scaling to the bed scale. The collected information is then used to construct
 a set of equations which is able to predict the flow dynamic (turbulent and
 dispersive mixing) mechanisms and the radial heat transfers at the macroscopic
 295 scale. It is for instance highlighted that transfer mechanisms are mainly driven
 by the dispersion and that the second order dispersive fluctuations observe the
 Boussinesq hypothesis at the macroscopic level. Moreover, a near wall zone
 with a thickness of $d_p/2$ is identified. The channeling effect occurring in the
 near wall zone is observed to be responsible for the thermal resistance existing
 300 in this zone. Indeed, The dynamic viscosity is damped (decrease of the disper-
 sive mixing) which leads to a damped heat transfers over this region. Finally,
 considering a weakly disrupted thermal boundary layer, a linear law for the
 effective conductivity is proposed to estimate the boundary layer heat transfer.
 It enabled to succesfully assess the wall temperature and the wall heat transfer
 305 coefficient.

Appendix A. up-scaling the turbulent kinetic energy

the governing equation for the turbulent kinetic energy at the pore scale
 reads,

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \nabla_j k \overline{u_j} = -\nabla_j \left[\frac{\overline{P' u_j'}}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_j'} \right] + \nu \nabla_j^2 k - \overline{u_i' u_j'} \frac{\partial \overline{u_i}}{\partial x_j} - \epsilon \quad (\text{A.1})$$

Applying the volume averaging operator to (A.1), one gets,

$$\begin{aligned}
\phi \frac{\partial \langle k \rangle^i}{\partial t} = & -\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k \rangle^i] + \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k \rangle^i] - \langle R_{ij} \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] \\
& - \nabla_j \left(\phi \left\langle \left[\frac{\bar{P}' u_j'}{\rho} + \overline{u_i' u_i' u_j'} \right]^i \right\rangle \right) - \phi \langle \epsilon \rangle^i \\
& - \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i + \frac{\nu}{V} \int \nabla_j k n_j dS - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_j \delta k \rangle^i]
\end{aligned} \tag{A.2}$$

where $\overline{u_i' u_j'} = R_{ij}$.

Appendix B. dispersive kinetic energy

Subtracting (14) from the pore scale momentum conservation equation and multiplying by $\delta \bar{u}_i$ the obtained equation and finally applying the volume averaging operator, one gets

$$\begin{aligned}
0 = & -\langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\langle \bar{u}_i \rangle^i \delta \bar{u}_j] \rangle^v - \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\langle \bar{u}_j \rangle^i \delta \bar{u}_i] \rangle^v - \langle \delta \bar{u}_i \nabla_i \frac{\delta \bar{P}}{\rho} \rangle^v \\
& + \nu \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j^2 \delta \bar{u}_i \rangle^v - \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j [\delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j] \rangle^v - \langle \delta \bar{u}_i \nabla_j \delta R_{ij} \rangle^v
\end{aligned} \tag{B.1}$$

which can be rearranged to obtain the governing equation for the kinetic energy of the dispersive fluctuations.

$$\begin{aligned}
0 = & -\nabla_j [\phi \langle \bar{u}_j \rangle^i \langle k_d \rangle^i] - \frac{1}{\rho} \nabla_i [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{P} \rangle^i] - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] \\
& + \nu \nabla_j^2 [\phi \langle k_d \rangle^i] - \phi \langle \epsilon_d \rangle^i - \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j [\phi \langle \bar{u}_i \rangle^i] + \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^i}{\rho V} \int \delta \bar{P} n_i dS \\
& - \frac{\nu \langle \bar{u}_i \rangle^i}{V} \int \nabla_j \delta \bar{u}_i n_j dS + \langle \bar{u}_j \rangle^i \nabla_j \phi [3 \langle k_d \rangle^i - \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] \\
& - \nu \nabla_j [\nabla_j \phi \frac{\langle \bar{u}_i \rangle^{i2}}{2}] + \phi \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i + \phi \langle \delta R_{ij} \nabla_j \delta \bar{u}_i \rangle^i \\
& - \nabla_j [\phi \langle \delta \bar{u}_i \delta R_{ij} \rangle^i] + [\langle R_{ij} \rangle^i + \langle \delta \bar{u}_i \delta \bar{u}_j \rangle^i] \langle \bar{u}_i \rangle^i \nabla_j \phi
\end{aligned} \tag{B.2}$$

Appendix C. Strongly disrupted boundary layer

In this case, the temperature field can be split up according to

$$\langle \bar{T} \rangle^i = \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \frac{\langle \bar{T} \rangle^{i1}}{\epsilon} \tag{C.1}$$

with $\epsilon \ll 1$. Thus,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^i \right] &= A^{(3)} \\ \frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \left(\epsilon \langle \bar{T} \rangle^{i0} + \langle \bar{T} \rangle^{i1} \right) \right] &= \epsilon A^{(3)} \end{aligned} \quad (C.2)$$

310 *0 order term in ϵ :*

$$\frac{\partial}{\partial r^*} \left[(\phi \lambda_{eff}) \frac{\partial}{\partial r^*} \langle \bar{T} \rangle^{i1} \right] = 0 \quad (C.3)$$

As the disruption is generated by the solid particles, one can relate it to the spatial fluctuation and seek $\langle \bar{T} \rangle^{i1}$ in the form [63],

$$\langle \bar{T} \rangle^{i1} = \eta (Re_p) \nabla_r \langle \bar{T} \rangle^{i0} \quad (C.4)$$

Tacking into account the closure (C.4) in (C.3) one can deduce,

$$\phi \lambda_{eff}(r^*) = \eta^{(1)} (Re_p) r^{*2} \quad (C.5)$$

The profile is hence showed to be quadratic within a highly disturbed boundary
315 layer. It is consistent with the empirical expression derived in [10].

References

- [1] A. P. D. Wasch, G. F. Froment, Heat transfer in packed beds, Chem. Eng. Sci. 27 (1972) 567–576.
- [2] G. Froment, Analysis and design of fixed bed catalytic reactors, Chem. Reaction Eng. 109 (1972) 1–55.
- 320 [3] J. Beek, Design of packed catalytic reactors, Adv. Chem. Eng. 3 (1962) 203–271.
- [4] C. Li, B. Finlayson, Heat transfer in packed beds - a reevaluation, Chem. Eng. Sci. 32 (1977) 1055–1066.
- 325 [5] O. Bey, G. Eigenberger, Fluid flow through catalyst filled tubes, Chem Eng. Sci. 52 (1997) 1365–1376.

- [6] T. Eppinger, K. Seidler, M. Kraume, Dem-cfd simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios, *Chem. Eng. J.* 166 (2011) 324–331.
- 330 [7] M. Behnam, A. Dixon, M. Nijemeisland, E. Stitt, A new approach to fixed bed radial heat transfer modeling using velocity fields from computational fluid dynamics simulations, *Ind. Eng. Chem. Res.* 52 (2013) 15244–15261.
- [8] A. Dixon, Fixed bed catalytic reactor modelling - the radial heat transfer problem, *Canadian J. Chem. Eng.* 90 (2012) 507–527.
- 335 [9] J. Papageorgiou, G. Froment, Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed bed reactors, *Chem Eng. Sci.* 50 (1995) 3043–3056.
- [10] M. Winterberg, E. Tsotsas, A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres, *Chem. Eng. Sci.* 55 (2000) 967–979.
- 340 [11] M. Winterberg, E. Tsotsas, Correlations for effective heat transport coefficients in beds packed with cylindrical particles, *Chem Eng. Sci.* 55 (2000) 5937–5943.
- [12] D. Vortmeyer, E. Haidegger, Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooled fixed bed chemical reactors, *Chem. Eng. Sci.* 46 (1991) 2951–2660.
- 345 [13] E. Smirnov, A. Muzykantov, V. Kuzmin, A. Kronberg, I. Zolotarskii, Radial heat transfer in packed beds of spheres, cylinders and rashing rings. verification of model with a linear variation of λ_{er} in the vicinity of the wall, *Chem Eng. J.* 91 (2003) 243–248.
- [14] D. Bunnell, H. Irvin, R. Olson, J. Smith, Effective thermal conductivities in gas-solid systems, *Ind. Eng. Chem.* 41 (1949) 1977–1981.
- 350 [15] S. Kwong, J. Smith, Radial heat transfer in packed beds, *Ind. Eng. Chem.* 49 (1957) 894–903.

- 355 [16] M. Ahmed, R. Fahien, Tubular reactor design-i, Chem. Eng. Sci. 35 (1980) 889–895.
- [17] D. Gunn, M. Ahmed, The characterisation of radial heat transfer in fixed beds, IChemE Symp. Ser. 86 (1984) 513–520.
- [18] D. Gunn, M. Ahmed, M. Sabri, Radial heat transfer to fixed beds of particles, Chem. Eng. Sci. 42 (1987) 2163–2171.
- 360 [19] D. Gunn, M. Sabri, A distributed model for liquid-phase heat transfer in fixed beds, Int. J. Heat Mass Transfer 30 (1987) 1693–1702.
- [20] J. Borkink, K. Westerterp, Significance of the radial porosity profile for the description of heat transport in wall-cooled packed beds, Chem. Eng. Sci. 49 (1994) 863–876.
- 365 [21] F. Mathey, Numerical up-scaling approach for the simulation of heat-transfer in randomly packed beds, Int. J. Heat Mass Transfer 61 (2013) 451–463.
- [22] J. Lerou, G. Froment, Velocity, temperature and conversion profiles in fixed bed catalytic reactors, Chem. Eng. Sci. 32 (1977) 853–861.
- 370 [23] J. Marivoet, P. Teodorou, S. Wajc, Porosity, velocity and temperature profiles in cylindrical packed beds, Chem. Eng. Sci. 29 (1974) 1836–1840.
- [24] D. Vortmeyer, J. Schuster, Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed beds by a variational method, Chem. Eng. Sci. 38 (1983) 1691–1699.
- 375 [25] O. Kalthoff, D. Vortmeyer, Ignition/extinction phenomena in a wall cooled fixed bed reactor. experiments and model calculations including radial porosity and velocity distributions, Chem. Eng. Sci. 35 (1980) 1637–1643.
- [26] X. Jia, M. Gan, R. Williams, D. Rhodes, Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities, Powder Technology 174 (2007) 10–13.
- 380

- [27] R. Caulkin, A. Ahmad, M. Fairweather, X. Jia, R. Williams, Digital prediction of complex cylinder packed columns, *Comp. and Chem. Eng.* 33 (2009) 10–21.
- [28] R. Caulkin, M. Fairweather, X. Jia, R. Williams, A numerical case study of packed columns, in: *European Symposium on Computer Aided process Engineering*, Elsevier Science B.V., 2005.
- [29] X. Jia, R. Williams, A packing algorithm for particles of arbitrary shapes, *Powder Technology* 120 (2001) 175–186.
- [30] A. Guardo, M. Coussirat, F. Recasens, M. Larrayoz, X. Escaler, Cfd study on particle-to-fluid heat transfer in fixed bed reactors: convective heat transfer at low and high pressure, *Chem. Eng. Sci.* 61 (2006) 4341–4353.
- [31] F. Augier, F. Idoux, J. Delenne, Numerical simulations of transfer and transport properties inside packed beds of spherical particles, *Chem. Eng. Sci.* 65 (2010) 1055–1064.
- [32] M. Nijemeisland, A. Dixon, Comparison of cfd simulations to experiment for convective heat transfer in a gas-solid fixed bed, *Chem. Eng. J.* 82 (2001) 231–246.
- [33] T. Atmakidis, E. Y. Kenig, Cfd-based analysis of the wall effect on the pressure drop in packed beds with moderate tube/particle ratios in laminar flow regime, *Chem. Eng. J.* 155 (2009) 404–410.
- [34] A. Dixon, G. Walls, H. Stanness, M. Nijemeisland, E. H. Stitt, Experimental validation of high reynolds number cfd simulations of heat transfer in a pilot-scale fixed bed tube, *Chem. Eng. J.* 200 (2012) 344–356.
- [35] S. Ookawara, M. Kuroki, D. Street, K. Ogawa, High-fidelity dem-cfd modeling of packed bed reactors for process intensification, in: *Proceedings of European Congress of Chemical Engineering*, Copenhagen, 2007.

- [36] A. Dixon, M. Nijemeisland, E. H. Stitt, Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds: Contact points study, *Computers Chem. Eng.* 48 (2013) 135–153.
- 410 [37] I. Thiagalingam, I. Bennaceur, M. Dallet, S. Cadalen, P. Sagaut, Exact non local expression for the wall heat transfer coefficient for in tubular catalytic reactors, *Int. J. Heat Fluid Flow* 54 97–106.
- [38] M. J. S. de Lemos, *Turbulence in porous media*, Elsevier, 2006.
- [39] W. Gray, P. Lee, On the theorems for local volume averaging of multiphase systems, *Int. J. Multiphase Flow* 3 (1977) 333–340.
- 415 [40] M. Quintard, S. Whitaker, Transport in ordered and disordered media i: the cellular average and the use of weighting functions, *Transport in porous media* 14 (1994) 163–177.
- [41] M. Quintard, S. Whitaker, Transport in ordered and disordered media i: generalized volume averaging, *Transport in porous media* 14 (1994) 179–206.
- 420 [42] A. Nakayama, F. Kuwahara, A macroscopic turbulence model for flow in a porous medium, *J. Fluids Eng.* 121 (1999) 427–433.
- [43] M. Chandesris, G. Serre, P. Sagaut, A macroscopic turbulence model for flow in porous media suited for channel, pipe and rod bundle flows, *Int. J. Heat Mass Transfer* 49 (2006) 2739–2750.
- 425 [44] H. Mickleley, K. Smith, E. Korchak, Fluid flow in packed beds, *Chem. Eng. Sci.* 23 (1965) 237–246.
- [45] I. Macdonald, M. El-Sayed, K. Mow, F. Dullien, Flow through porous media- ergun equation revisited, *Ind. Eng. Chem. Fund.* 18 (1979) 199–208.
- 430 [46] D. van der Merwe, W. Gauvin, Velocity and turbulence measurements of air flow through packed bed, *A.I.Ch.E. J.* 17 (1971) 519–528.

- [47] A. Dybbs, R. Edwards, A new look at porous media fluid mechanics-darcy
435 to turbulent, *Fund. Trans. Phenom. Porous Media* 82 (1984) 199–256.
- [48] T. Masuoka, Y. Takatsu, Turbulence model for flow through porous media,
Int. J. Heat Mass Trans. 39 (1996) 2803–2809.
- [49] M. de Lemos, M. Pedras, Recent mathematical models for turbulent flow
in saturated rigid porous media, *J. Fluids Eng.* 123 (2002) 935–940.
- 440 [50] M. Pedras, M. de Lemos, Macroscopic turbulence modeling for incompress-
ible flow through undeformable porous media, *Int. J. Heat Mass Transfer*
44 (2001) 1081–1093.
- [51] F. Teruel, Rizwan-uddin, A new turbulence model for porous media flows.
part i: Constitutive equations and model closure, *Int. J. Heat Mass Trans.*
445 52 (2009) 4264–4272.
- [52] F. Teruel, Rizwan-uddin, A new turbulence model for porous media flows.
part ii: Analysis and validation using microscopic simulations, *Int. J. Heat*
Mass Trans. 52 (2009) 5193–5203.
- [53] F. Teruel, Rizwan-uddin, Numerical computation of macroscopic turbu-
450 lence quantities in representative elementary volume of the porous medium,
Int. J. Heat Mass Trans. 53 (2010) 5190–5198.
- [54] F. Pinson, O. Gregoire, O. Simonin, k-e macro-scale modeling of turbulence
based on a two scale analysis in porous media, *Int. J. Heat Fluid Flow* 27
(2006) 955–966.
- 455 [55] S.Ergun, Fluid flow through packed columns, *Chem. Eng. Prog.* 48 (1952)
89–94.
- [56] F. Mathey, Macroscopic turbulent models for heat and mass transfer in
catalyst reactors, in: *AIP Conf. Proc.* 1453, 2012.

- [57] P. Cheng, D. Vortmeyer, Transverse thermal dispersion and wall channeling
460 in a packed bed with forced convective flow, Chem. Eng. Sci. 43 (1988)
2523–2532.
- [58] Y. Demirel, R. Sharma, H. Al-Ali, On the effective heat transfer parameters
in a packed bed, Int. J. Heat Mass Trans. 43 (2000) 327–332.
- [59] A. Dixon, M. DiCostanzo, B. Soucy, Fluid-phase radial transport in packed
465 beds of low tube-to-particle diameter ratio, Int. J. Heat and Mass Transfer
27 (1984) 1701–1713.
- [60] A. Dixon, Heat transfer in fixed beds at very low(< 4)tube-to-particle
diameter ratio, Ind. Eng. Res. 36 (1997) 3053–3064.
- [61] P. Peters, R. Schiffino, P. Harriott, Heat transfer in packed tube reactors,
470 Int. Eng. Chem. Res. 27 (1988) 226–233.
- [62] A. Dixon, L. Labua, Wall-to-fluid coefficients for fixed bed heat and mass
transfer, Int. J. Heat Mass Transfer 28 (1985) 879–881.
- [63] M. Drouin, O. Grégoire, O. Simonin, A. Chanoine, Macroscopic modeling of
thermal dispersion for turbulent flows in channels, Int. J. Heat Mass Transfer
475 53 (2010) 2206–2217.

Bibliographie

- [1] AFHYPAC. Situation mondiale de l'énergie. http://www.afhypac.org/images/documents/fiche_2.1_situation_mondiale_de_l_energie_rev_mars_2013_th_a.pdf, 2013.
- [2] Bp energy outlook 2035. http://www.bp.com/content/dam/bp/pdf/Energy-economics/Energy-Outlook/Energy_Outlook_2035_booklet.pdf, 2014.
- [3] Clefs CEA numéro 50/51. L'hydrogène, les nouvelles technologies de l'énergie. <http://www.cea.fr/technologies/1-hydrogene-les-nouvelles-technologies-de-l-ene>, 2004-2005.
- [4] AFHY. Production et consommation d'hydrogène aujourd'hui. <http://www.afh2.org/uploads/memento/Fiche1.3revisionfevrier2008.pdf>, 2008.
- [5] AFHYPAC. Production d'hydrogene a partir des procedes de reformage et d'oxydation partielle. http://www.afhypac.org/images/documents/fiche_3.1.1_vaporeform.oxyd.part._oct.2011.pdf, 2004-2005.
- [6] S.Ergun. Fluid flow through packed columns. *Chem. Eng. Prog.*, 48 :89–94, 1952.
- [7] I. Ziolkowska and D. Ziolkowski. Fluid flow inside packed beds. *Chem. Eng. Process.*, 23 :137–164, 1988.
- [8] A.D. Dixon. Fixed bed catalytic reactor modelling - the radial heat transfer problem. *Canadian J. Chem. Eng.*, 90, 2012.
- [9] J.B. Wagstaff and A.E. Nirmaier. Air flow in beds of granular solids. *Ind. Eng. Chem.*, 47 :1129–1155, 1955.
- [10] C. McGreavy, E.A. Foumeny, and K.H. Javed. Characterization of transport properties for fixed bed in terms of local bed structure and flow distribution. *Chem Eng. Sci.*, 41 :787–797, 1986.

- [11] O. Bey and G. Eigenberger. Fluid flow through catalyst filled tubes. *Chem Eng. Sci.*, 52 :1365–1376, 1997.
- [12] J.N. Papageorgiou and G.F. Froment. Simulation models accounting for radial voidage profiles in fixed bed reactors. *Chem Eng. Sci.*, 50 :3043–3056, 1995.
- [13] E.A. Foumeny, F. Benyahia, J.A.A. Castro, H.A. Moallemi, and S. Roshani. Correlations of pressure drop in packed beds taking into account the effect of confining wall. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 36 :536–540, 1993.
- [14] N.M. Zhavoronkov, M.E. Aerov, and N.N. Umnik. Hydraulic resistance and density of packing of a granular bed. *J. Phys. Chem.*, 23 :342–361, 1949.
- [15] W. Reichelt. Zur berechnung des druckverlustes einphasig durchstromter kugel-und zylinderschuttungen. *Chem. Ing. Tech.*, 44 :1068–1071, 1972.
- [16] Y.S. Choi, S.J. Kim, and D. Kim. A semi-empirical correlation for pressure drop in packed beds of spherical particles. *Trans. Porous Med.*, 75 :133–149, 2008.
- [17] D. Mehta and M.C. Hawley. Wall effect in packed columns. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, 8 :280–282, 1969.
- [18] G.F. Froment. Design of fixed-bed catalytic reactors based on effective transport models. *Chem. Eng. Sci.*, 17 :849–859, 1962.
- [19] G.F. Froment. Fixed bed catalytic reactors. current design status. *Ind. Eng. Chem.*, 59 :18–27, 1967.
- [20] J. Beek. Design of packed catalytic reactors. *Adv. Chem. Eng.*, 3 :203–271, 1962.
- [21] E. Tsotsas and E.U. Schlünder. Heat transfer in packed beds with fluid flow : remarks on the meaning and the calculation of heat transfer coefficient at the wall. *Chem. Eng. Sci.*, 45 :819–837, 1990.
- [22] A. Grah, U. Nowak, M. Schreier, and R. Adler. Radial heat transfer in fixed-bed packing with small tube/particle diameter ratios. *Heat Mass Trans.*, 45 :417–425, 2009.
- [23] A.G. Dixon and M. Nijemeisland. Cfd as a design tool for fixed-bed reactors. *Ind. Eng. Chem.*, 40 :5246–5254, 2001.
- [24] T. Eppinger, K. Seidler, and M. Kraume. Dem-cfd simulations of fixed bed reactors with small tube to particle diameter ratios. *Chem. Eng. J.*, 166 :324–331, 2011.

- [25] A.G. Dixon, G. Walls, H. Stanness, M. Nijemeisland, and E. H. Stitt. Experimental validation of high reynolds number cfd simulations of heat transfer in a pilot-scale fixed bed tube. *Chem. Eng. J.*, 200 :344–356, 2012.
- [26] R. Caulkin, M. Fairweather, X. Jia, and R.A. Williams. A numerical case study of packed columns. In *European Symposium on Computer Aided process Engineering*. Elsevier Science B.V., 2005.
- [27] X. Jia and R.A. Williams. A packing algorithm for particles of arbitrary shapes. *Powder Technology*, 120 :175–186, 2001.
- [28] X. Jia, M. Gan, R.A. Williams, and D. Rhodes. Validation of a digital packing algorithm in predicting powder packing densities. *Powder Technology*, 174 :10–13, 2007.
- [29] R. Caulkin, A.Ahmad, M. Fairweather, X. Jia, and R.A. Williams. Digital prediction of complex cylinder packed columns. *Comp. and Chem. Eng.*, 33 :10–21, 2009.
- [30] R. P. Zou and A. B. Yu. The packing of spheres in a cylindrical container : the thickness effect. *Chem. Eng. Sci.*, 50 :1504–1507, 1995.
- [31] Wikipedia. Types of mesh. http://en.wikipedia.org/wiki/Types_of_mesh, 2014.
- [32] H.P.A. Calis, J. Nijenhuis, B.C. Paikert, F.M. Dautzenberg, and C.M. van den Bleek. Cfd modelling and experimental validation of pressure drop flow in a novel structured catalytic reactor packing. *Chem Eng. Sci.*, 56 :1713–1720, 2001.
- [33] imarcade. Curvilinear-lines. <http://imarcade.com/1/curvilinear-lines/>.
- [34] tudelft. Development of an unstructured finite-volume flow solver. <http://ta.twi.tudelft.nl/users/wesselin/projects/unstructured.html>.
- [35] cfd online. [icem] 2d hybrid mesh (merge mesh). <http://www.cfd-online.com/Forums/ansys-meshing/105829-2d-hybrid-mesh-merge-mesh.html>, 2012.
- [36] F. Juretic. *Error analysis in finite volume CFD*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 2004.
- [37] A.G. Dixon and J. H. van Dongeren. The influence of the tube and particle diameters at constant ratio on heat transfer in packed beds. *Chem. Eng. and Process.*, 37 :23–32, 1998.

- [38] A.G. Dixon, M. Nijemeisland, and E. Hugh Stitt. Systematic mesh development for 3d cfd simulation of fixed beds : Contact points study. *Computers Chem. Eng.*, 48 :135–153, 2013.
- [39] P. Sagaut and C. Cambon. *Homogeneous turbulence dynamics*. Cambridge University Press, 2008.
- [40] J.O. Hinze. *Turbulence*. McGraw-Hill Publishing Co., 1975.
- [41] S.B. Pope. *Turbulent flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [42] H. Schlichting and K. Gersten. *Boundary layer theory, 8th edition*. Springer, 2000.
- [43] B. A. Kader. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 24 :1541–1544, 1981.
- [44] *Ansys Fluent 12.0 Theory Guide*.
- [45] M. Wolfshtein. The velocity and temperature distribution of one-dimensional flow with turbulence augmentation and pressure gradient. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 12 :301–318, 1969.
- [46] H.C. Chen and V.C. Patel. Near-wall turbulence models for complex flows including separation. *AIAA Journal*, 2 :641–648, 1964.
- [47] M. Boudjeris. Calcul des performances aérodynamiques de la configuration aile-fuselage ara m100 par maillage hybride. http://www.memoireonline.com/05/12/5815/m_Calcul-des-performances-aerodynamiques-de-la-configuration-aile-fuselage-Ara-M100-par-maillage-hybr21.html.
- [48] W.G. Gray and P.C.Y. Lee. On the theorems for local volume averaging of multiphase systems. *Int. J. Multiphase Flow*, 3 :333–340, 1977.
- [49] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered media i : the cellular average and the use of weighting functions. *Transport in porous media*, 14 :163–177, 1994.
- [50] M. Quintard and S. Whitaker. Transport in ordered and disordered media i : generalized volume averaging. *Transport in porous media*, 14 :179–206, 1994.
- [51] N. Luan Nguyen, V. van Buren, R. Reimer, and A. von Garnier. Determination of porosity and flow distribution in packed beds by magnetic resonance imaging. *Magnetic Resonance Imaging*, 23 :395–396, 2005.

- [52] J. Theuerkauf, P. Witt, and D. Schwesig. Analysis of particle porosity distribution in fixed beds using the discrete element method. *Powder Technology*, 165 :92–99, 2006.
- [53] C. Li and B. Finlayson. Heat transfer in packed beds - a reevaluation. *Chem. Eng. Sci.*, 32 :1055–1066, 1977.
- [54] G.F. Froment. Analysis and design of fixed bed catalytic reactors. *Chem. Reaction Eng.*, 109 :1–55, 1972.
- [55] A.D. Dixon. An improved equation for the overall heat transfer coefficient in packed beds. *Chem. Eng. Process.*, 35, 1996.
- [56] C.A. Coberly and W.R. Marshall. Temperature gradients in gas streams flowing through fixed granular bed. *Chem. Eng. Prog.*, 47 :141–150, 1951.
- [57] S. Yagi and N. Wakao. Heat and mass transfer from wall to fluid in packed beds. *AIChE Journal*, 5, 1959.
- [58] A.P. De Wasch and G.F. Froment. Heat transfer in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 27 :567–576, 1972.
- [59] C. von Scala, M. Wehrli, and G. Gaiser. Heat transfer measurements and simulation of katapak-m catalyst supports. *Chem. Eng. Sci.*, 54 :1375–1381, 1999.
- [60] S. Yagi and D. Kunii. Studies on effective thermal conductivities in packed beds. *AIChE Journal*, 3, 1957.
- [61] R. Bauer and E.U. Schl. Effective radial thermal conductivity of packings in gas flow. part ii thermal conductivity of the packing fraction without gas flow. *Int. Chem. Eng.*, 18 :189–204, 1978.
- [62] A.G. Dixon. Heat transfer in fixed beds at very low(< 4)tube-to-particle diameter ratio. *Ind. Eng. Res.*, 36 :3053–3064, 1997.
- [63] Y. Demirel, R.N. Sharma, and H.H. Al-Ali. On the effective heat transfer parameters in a packed bed. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 43 :327–332, 2000.
- [64] S. Yagi, D. Kunii, and Y. Shimomura. Studies on heat transfer in packed bed with fluid flow. *Chm. Eng. Japan*, 21, 1957.
- [65] J. Xu and G. Froment. Methane steam reforming : Ii diffusional limitations and reactor simulation. *AIChE Journal*, 35, 1989.
- [66] H. Martin and M. Nilles. Radiale wärmeleitung in durchströmten schüttungsrohren. *Chem. Ing. Tec.*, 65 :1468–1477, 1993.

- [67] A.G. Dixon, M.A. DiCostanzo, and B.A. Soucy. Fluid-phase radial transport in packed beds of low tube-to-particle diameter ratio. *Int. J. Heat and Mass Trans.*, 27 :1701–1713, 1984.
- [68] P. Peters, R. Schifano, and P. Harriott. Heat transfer in packed tube reactors. *Int. Eng. Chem. Res.*, 27 :226–233, 1988.
- [69] H.S. Mickley, K.A. Smith, and E.I. Korchak. Fluid flow in packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 23 :237–246, 1965.
- [70] I.F. Macdonald, M.S. El-Sayed, K. Mow, and F.A.L. Dullien. Flow through porous media- ergun equation revisited. *Ind. Eng. Chem. Fund.*, 18 :199–208, 1979.
- [71] D.F. van der Merwe and W.H. Gauvin. Velocity and turbulence measurements of air flow through packed bed. *A.I.Ch.E. J.*, 17 :519–528, 1971.
- [72] A. Dybbs and R.V. Edwards. A new look at porous media fluid mechanics-darcy to turbulent. *Fund. Trans. Phenom. Porous Media*, 82 :199–256, 1984.
- [73] T. Masuoka and Y. Takatsu. Turbulence model for flow through porous media. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 39 :2803–2809, 1996.
- [74] B.A. Goeckner, D.R. Helmich, T.A. McCarthy, J.M. Arinez, T.E. Peard, J.E. Peters, M.Q. Brewster, and R.O. Buckius. Radiative heat transfer augmentation of natural gas flames in radiant tube burners with porous ceramic inserts. *Exp. Therm. Fluid Sci.*, 5 :848–860, 1992.
- [75] J.G. Lim and R.D. Matthews. Development of a model for turbulent combustion within porous inert media. *Trans. Phenomena Therm. Eng.*, 1 :631–636, 1993.
- [76] B.V. Antohe and J.L. Lage. A general two-equation macroscopic turbulence model for incompressible flow in porous media. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 40 :3013–3024, 1997.
- [77] A. Nakayama and F. Kuwahara. A macroscopic turbulence model for flow in a porous medium. *J. Fluids Eng.*, 121 :427–433, 1999.
- [78] M.J.S. de Lemos and M.H.J. Pedras. Recent mathematical models for turbulent flow in saturated rigid porous media. *J. Fluids Eng.*, 123 :935–940, 2002.
- [79] M.H.J. Pedras and M.J.S. de Lemos. On the definition of turbulent kinetic energy for flow in porous media. *Int. Comm. Heat Mass Transfer*, 27 :211–220, 2000.

- [80] M.H.J. Pedras and M.J.S. de Lemos. Macroscopic turbulence modeling for incompressible flow through undeformable porous media. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 44 :1081–1093, 2001.
- [81] M.J.S. de Lemos. *Turbulence in porous media*. Elsevier, 2006.
- [82] F.E. Teruel and Rizwan-uddin. A new turbulence model for porous media flows. part i : Constitutive equations and model closure. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 52 :4264–4272, 2009.
- [83] F.E. Teruel and Rizwan-uddin. Numerical computation of macroscopic turbulence quantities in representative elementary volume of the porous medium. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 53 :5190–5198, 2010.
- [84] F.E. Teruel and Rizwan-uddin. A new turbulence model for porous media flows. part ii : Analysis and validation using microscopic simulations. *Int. J. Heat Mass Trans.*, 52 :5193–5203, 2009.
- [85] F.E. Teruel. *Macroscopic turbulence modeling and simulation for flow through porous media*. PhD thesis, University of Illinois, Urbana-Champaign, 2007.
- [86] M.R. Raupach and R.H. Shaw. Averaging procedures for flow within vegetation canopies. *Boundary-Lay. Meteorol.*, 22 :79–90, 1982.
- [87] F. Pinson, O. Gregoire, and O. Simonin. k-e macro-scale modeling of turbulence based on a two scale analysis in porous media. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 27 :955–966, 2006.
- [88] F. Pinson. *Modélisation à l’échelle macroscopique d’un écoulement turbulent au sein d’un milieu poreux*. PhD thesis, INP Toulouse, 2006.
- [89] F. Mathey. Macroscopic turbulent models for heat and mass transfer in catalyst reactors. In *AIP Conf. Proc.* 1453, 2012.
- [90] D. Vortmeyer and J. Schuster. Evaluation of steady flow profiles in rectangular and circular packed beds by a variational method. *Chem. Eng. Sci.*, 38 :1691–1699, 1983.
- [91] M. Giese, K. Rottschäfer, and D. Vortmeyer. Measured and modelled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow. *AIChE*, 44 :484–490, 1998.
- [92] I. Ziolkowska and D. Ziolkowski. Modelling of gas interstitial velocity radial distribution over a cross-section of a tube packed with a granular catalyst bed. *Chem. Eng. Sci.*, 48 :3283–3292, 1993.

- [93] D. Vortmeyer and E. Haidegger. Discrimination of three approaches to evaluate heat fluxes for wall-cooled fixed bed chemical reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 46 :2651–2660, 1991.
- [94] M. Winterberg and E. Tsotsas. A simple and coherent set of coefficients for modelling of heat and mass transport with and without chemical reaction in tubes filled with spheres. *Chem. Eng. Sci.*, 55 :967–979, 2000.
- [95] M. Winterberg and E. Tsotsas. Correlations for effective heat transport coefficients in beds packed with cylindrical particles. *Chem. Eng. Sci.*, 55 :5937–5943, 2000.
- [96] T. Daszkowski and G. Eigenberger. A reevaluation of fluid flow, heat transfer and chemical reaction in catalyst filled tubes. *Chem. Eng. Sci.*, 47 :2245–2250, 1992.
- [97] D.G. Bunnell, H.B. Irvin, R.W. Olson, and J.M. Smith. Effective thermal conductivities in gas-solid systems. *Ind. Eng. Chem.*, 41 :1977–1981, 1949.
- [98] S.S. Kwong and J.M. Smith. Radial heat transfer in packed beds. *Ind. Eng. Chem.*, 49 :894–903, 1957.
- [99] M. Ahmed and R.W. Fahien. Tubular reactor design-i. *Chem. Eng. Sci.*, 35 :889–895, 1980.
- [100] D.J. Gunn and M.M. Ahmed. The characterisation of radial heat transfer in fixed beds. *ICHEME Symp. Ser.*, 86 :513–520, 1984.
- [101] D.J. Gunn, M.M. Ahmed, and M.N. Sabri. Radial heat transfer to fixed beds of particles. *Chem. Eng. Sci.*, 42 :2163–2171, 1987.
- [102] D.J. Gunn and M.N. Sabri. A distributed model for liquid-phase heat transfer in fixed beds. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 30 :1693–1702, 1987.
- [103] E.I. Smirnov, A.V. Muzykantov, V.A. Kuzmin, A.E. Kronberg, and I.A. Zolotarskii. Radial heat transfer in packed beds of spheres, cylinders and rashing rings. verification of model with linear variation of λ_{er} in the vicinity of the wall. *Chem. Eng. J.*, 91 :243–248, 2003.
- [104] J.G.H. Borkink and K.R. Westerterp. Significance of the radial porosity profile for the description of heat transport in wall-cooled packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 49 :863–876, 1994.
- [105] P. Cheng and D. Vortmeyer. Transverse thermal dispersion and wall channeling in a packed bed with forced convective flow. *Chem. Eng. Sci.*, 43 :2523–2532, 1988.

- [106] J.J. Lerou and G.F. Froment. Velocity, temperature and conversion profiles in fixed bed catalytic reactors. *Chem. Eng. Sci.*, 32 :853–861, 1977.
- [107] J. Marivoet, P. Teodoriou, and S.J. Wajc. Porosity, velocity and temperature profiles in cylindrical packed beds. *Chem. Eng. Sci.*, 29 :1836–1840, 1974.
- [108] O. Kalthoff and D. Vortmeyer. Ignition/extinction phenomena in a wall cooled fixed bed reactor. experiments and model calculations including radial porosity and velocity distributions. *Chem. Eng. Sci.*, 35 :1637–1643, 1980.
- [109] M. Drouin, O. Grégoire, O. Simonin, and A. Chanoine. Macroscopic modeling of thermal dispersion for turbulent flows in channels. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 53 :2206–2217, 2010.
- [110] M. Drouin. *Modélisation des écoulements anisothermes en milieu macroporeux par une approche de double filtrage*. PhD thesis, INP Toulouse, 2010.
- [111] F. Mathey. Numerical up-scaling approach for the simulation of heat-transfer in randomly packed beds. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 61 :451–463, 2013.
- [112] H. Suzuki, K. Suzuki, and T. Sato. Dissimilarity between heat and momentum transfer in a turbulent boundary layer disturbed by a cylinder. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 31 :259–265, 1988.
- [113] A.G. Dixon and L.A. Labua. Wall-to-fluid coefficients for fixed bed heat and mass transfer. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 28, 1985.
- [114] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 1995.
- [115] H. Jasak. *Error analysis and estimation in the finite volume method with applications to fluid flows*. PhD thesis, Imperial College, University of London, 1996.
- [116] S.V. Patankar. *Numerical heat transfer and fluid flow*. Hemisphere Publishing Corporation, 1981.
- [117] P. Sagaut. *Large-eddy simulation for incompressible flows-An introduction, third edition*. Springer-Verlag, Scientific Computation series, 2005.

- [118] A. Fadai-Ghotbi. *Modélisation de la turbulence en situation instationnaire par approches URANS et hybride RANS-LES. Prise en compte des effets de paroi par ondération elliptique*. PhD thesis, Université de Poitiers, 2007.
- [119] R. Abid. A two-equation turbulence model for compressible flows. In *Technical Report AIAA-91-1781, AIAA 22nd Fluid Dynamics, Plasma Dynamics and Lasers Conference*, 1991.